# ANALYSE DES $L_{2,3}$-AUGERSPEKTRUMS VON ARGON DURCH ANREGUNG MIT LEICHTEN IONEN UND ELEKTRONEN

INAUGURALDISSERTATION
zur Erlangung der Doktorwürde
der
Freien Universität Berlin
Fachbereich Physik

vorgelegt von
Detlef Ridder
aus Berlin

September 1977

# ANALYSE DES $L_{2,3}$-AUGERSPEKTRUMS VON ARGON DURCH ANREGUNG MIT LEICHTEN IONEN UND ELEKTRONEN

INAUGURALDISSERTATION

zur Erlangung der Doktorwürde

der

Freien Universität Berlin
Fachbereich Physik

vorgelegt von

Detlef Ridder
aus Berlin

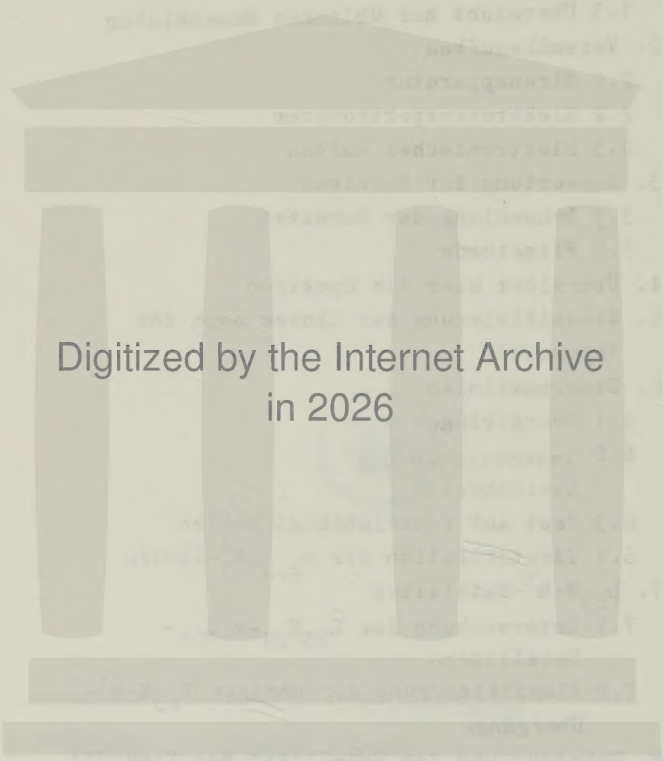
September 1977

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

1. Gutachter: Prof. Dr. K.H. Lindenberger
2. Gutachter: Prof. Dr. J. Andrä
Tag der Promotion: 2. 12. 1977

Inhalt


Zusammenfassung 1
Einleitung 3
1. Grundlagen
1.1 Phänomenologische Beschreibung des Zerfalls von Leerstellen in inneren Schalen 6
1.2 Berechnung von Übergangsenergien 12
1.3 Übersicht zur üblichen Nomenklatur 20
2. Versuchsaufbau
2.1 Streuapparatur 21
2.2 Elektronenspektrometer 24
2.3 Elektronischer Aufbau 27
3. Auswertung der Spektren
3.1 Behandlung der Rohdaten 29
3.2 Fitmethode 31
4. Übersicht über die Spektren 34
5. Klassifizierung der Linien nach der Intensität 42
6. Diagrammlinien
6.1 Energielagen 45
6.2 Intensitäten und Linienbreite 50
6.3 Test auf Winkelabhängigkeiten 54
6.4 Identifikation der $L_{2,3}$-$M_1^2$-Linien 56
7. $L_{23}M$-$M^3$-Satelliten
7.1 Untersuchung der $L_{23}M_{23}$-$M_1^2M_{23}$-Satelliten 66
7.2 Klassifizierung der übrigen $L_{23}M$-$M^3$-Übergänge 79
8. Untersuchung der Satelliten des Typs III 87
9. $L_{23}M_{23}^2$-$M_1^2M_{23}^2$-Satellitenübergänge 91
Schlußfolgerungen 102
Literaturhinweise 104
Anhang 109
A.1 Energien und Intensitäten der untersuchten Linien 110
A.2 Übersicht über die beobachteten Linien mit Klassifikationen und Angabe des Typs 117



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41549616_0058

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird das Augerelektronenspektrum der 2p-Schale von Argon untersucht. Sehr hohe Auflösung eines elektrostatischen Parallel-Platten-Spektrometers erlaubt die Trennung vieler Linien. Die Identifikation dieser Linien wird mit zwei Methoden versucht. Die eine Methode besteht darin, daß das Argon durch verschiedene Projektile mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten angeregt wird. Das hat zur Folge, daß sich bestimmte Liniengruppen durch ihre Intensitäten unterscheiden lassen. Zum zweiten werden zur Identifikation der Linien relative Energien mit existierenden optischen Daten und eigenen Rechnungen verglichen. Dabei werden auch existierende berechnete Intensitäten berücksichtigt.

Die Messungen wurden mit einer "crossed-beam"-Apparatur durchgeführt. Die vom Streuzentrum emittierten Sekundärelektronen wurden unter $150^{o}$ relativ zum Projektilstrahl mit einem elektrostatischen Parallel-Platten-Spektrometer analysiert. Das höchste erreichte Auflösungsvermögen betrug 0,08% bei 200 eV. In den Elektronenspektren von 145 eV bis 210 eV konnten insgesamt 142 Linien beobachtet werden. Durch Fit wurden die relativen Intensitäten bestimmt. Die Energielagen und Linienbreiten wurden als weitere Parameter durch sukzessives Probieren optimiert. Die Form der gemessenen Linien wurde durch eine Faltung einer Lorentz-Verteilung mit einer aus dem Spektrum selbst abgeleiteten Spektrometerfunktion wiedergegeben.

Die Argon-Atome wurden durch verschiedene Projektile angeregt. Es wurden 100- bis 500-keV-$H^{+}$ , 300- bis 500-keV-$He^{+}$ und 2,5-keV-$e^{-}$ verwendet. Dadurch variierten die Projektilgeschwindigkeiten zwischen 1,7 und 13,6 a.u.. Zwei Linientypen unterschieden sich klar durch ihre Intensitätsvariationen als Funktion der Projektilgeschwindigkeit. Eine dritte Liniengruppe war deutlich intensiver nach Anregung durch $He^{+}$. Auf Grund dieser Grobeinteilung der Linien in drei Klassen war es im Folgenden nur noch nötig, Linien innerhalb einer Klasse anhand von relativen

Energien oder berechneten Intensitäten zu identifizieren.

Die Untersuchung der Diagrammlinien $L_2$-$M^2$ und $L_3$-$M^2$ zeigte gute Übereinstimmung der gemessenen Energielagen mit den berechneten Werten für die $L_{2,3}$-$M_{23}^2$-Übergänge. Jedoch bemerkte man bei den Energien der $L_{2,3}$-$M_1M_{23}$-Übergänge den Einfluß von Konfigurationswechselwirkung, die für die $L_{2,3}$-$M_1^2$-Übergänge besonders stark ist. Im Falle der $L_{2,3}$-$M_1^2$-Übergänge wurde eine Neuklassifizierung basierend auf Rechnungen und Vergleichen mit bekannten Termen in der Nähe des $M_1^2$-Terms vorgenommen.

In der Gruppe der $L_{23}M$-$M^3$-Übergange wurden zahlreiche Linien im Spektrum beobachtet und teilweise neu klassifiziert. Grundlage für diese Neuklassifikationen waren optisch gemessene Energien für die $L_{23}M_{23}$-Multiplett-Terme. Die $L_{23}M_1$-$M^3$-Übergänge wurden nach hier berechneten Energien für die Anfangszustände und optisch gemessenen Energien für die Endzustände klassifiziert.

Die Gruppe der $L_{23}M_{23}^2$-$M_1^2M_{23}^2$-Satelliten wurde anhand berechneter Übergangsenergien erstmals im Spektrum lokalisiert. Es wurden auch Rechnungen für die relativen Energien der Terme des Anfangszustandes in intermediärer Kopplung vorgenommen. Basierend auf diesen Rechnungen sowie auf der Multiplettaufspaltung des Endzustandes war eine Klassifizierung vieler Linien möglich.
Diese Klassifizierung kann jedoch erst als gesichert betrachtet werden, wenn auch ein Vergleich theoretisch abgeschätzter Intensitäten zusätzliche Bestätigung liefert.

Einleitung

Die Spektroskopie von Augerelektronen hat in den letzten Jahren große Bedeutung bei der Untersuchung der Struktur der Atomhülle gewonnen. Die Spektroskopie der Augerelektronen ist bei der Untersuchung der inneren Schalen von Atomen der Röntgenspektroskopie in der Auflösung überlegen. Untersucht man Strukturen in den äußeren Schalen, dann besitzt jedoch die optische Spektroskopie das höhere Auflösungsvermögen. Bei den Schalen, die entweder durch die Vakuum-Ultraviolett-Spektroskopie oder die Augerspektroskopie untersucht werden können, war bis vor kurzem noch die Augerspektroskopie die einzige hochauflösende Methode. So gelang es, im Augerspektrum der Argon $L_2$- und $L_3$-Schale nicht nur die Multipletts der Anfangs- und Endzustände aufzulösen, sondern es wurden sogar Feinstrukturaufspaltungen sichtbar /RDS76/. Den entsprechenden Röntgenspektren, aufgenommen mit herkömmlichen Kristallspektrometern, waren dagegen nur mittlere Energien, über alle Terme eines Multipletts gemittelt, zu entnehmen /Oo74/. Erst kürzlich gelang es Nordgren und Mitarbeitern, dieses Spektrum mit einem holografischen Gitter in einzelne Linien aufzulösen /NANS76/. Das damit erreichte Auflösungsvermögen ist um einen Faktor zwei besser als das in der Augerspektroskopie erreichte.

Trotzdem hat aber die Augerspektroskopie noch zwei entscheidende Vorteile:

1.) Man kann mit dieser Methode auch Zustände untersuchen, die auf Grund von Auswahlregeln nicht durch optische Übergänge bevölkert werden können.
2.) Für leichte Atome ist der Augerzerfall viel wahrscheinlicher als der konkurrierende Röntgenübergang /FJMS66/.

Satellitenlinien, hervorgerufen durch gleichzeitige Ionisation und/oder Anregung mehrerer Elektronen, wurden schon früh in Röntgenspektren nachgewiesen /SS16/, aber ihre Beobachtung in Augerspektren gelang erstmals vor 11 Jahren /KM66/. Die Untersuchung der Satellitenstrukturen

gewann dann zunehmend an Bedeutung, als man das Targetatom nicht nur durch Elektronenstoß, sondern auch durch schwerere Projektile ionisierte. Es zeigten sich starke Abhängigkeiten der Satellitenintensitäten von der Kernladung, dem Ladungszustand und der Geschwindigkeit des Projektils /Sto76/. Die Mehrfachionisation nimmt mit abnehmender Projektilgeschwindigkeit zu. Das führt dazu, daß Satellitenlinien, die von mehrfach ionisierten Anfangszuständen des Targets herrühren, mit abnehmender Projektilgeschwindigkeit intensiver werden. Diese Beobachtung wurde bisher noch nicht zur Unterscheidung zwischen verschiedenen Linientypen benutzt.

Die ersten spektroskopischen Untersuchungen des Augerspektrums der L-Schale von Argon wurden von Mehlhorn und Mitarbeitern durchgeführt /Me68/, /MS68/, /MSV68/. Die dort erreichte Auflösung erlaubte sogar eine erste Bestimmung der Breite des $L_2$- bzw. $L_3$-Niveaus /MSV68/. In jenen Experimenten wurde die L-Schale des Argons durch Elektronenstoß ionisiert. Volz und Rudd /VR70/ benutzten $H^+$ und $H_2^+$ als Projektile, erreichten aber nicht das gute Auflösungsvermögen, das bei Anregung durch Elektronenstoß erzielt wurde. Hochaufgelöste Argon-L-Augerspektren wurden von Stolterfoht und Mitarbeitern nach Anregung durch $H^+$, $D^+$, $H_2^+$ und $He^+$ gemessen /SSZ74/ und einige Satellitenlinien durch Hartree-Fock-Rechnungen für die Übergangsenergien lokalisiert. Die Auflösung der Apparatur konnte noch verbessert werden, so daß einige der $L_{23}M$-$M^3$-Satelliten in Experimenten mit Elektronenstoßanregung weitgehend aufgelöst werden konnten /RDS75/, /Di76/ und bei Diagrammlinien $L_{2,3}$-MM Feinstrukturaufspaltungen beobachtbar wurden /RDS76/. Weitere hochaufgelöste $L_{2,3}$-Augerspektren wurden in den letzten Jahren von verschiedenen Autoren nach Anregung durch Elektronenstoß gemessen /Ko73/, /WBS73/.

Zum Teil hatten die obigen Arbeiten die Untersuchung des Ionisationsmechanismus zum Ziel. Dafür wurden integrale Größen wie Wirkungsquerschnitte für die Ionisation der $L_{2,3}$-Schale und die Wahrscheinlichkeit für Mehrfachionisa-

tion bestimmt /VR70/, /SSZ74/. Hauptsächlich wurden aber Größen bestimmt, die über die Atomstruktur Aufschluß geben, wie relative Intensitäten, Energien und natürliche Linienbreiten. Diese Daten zeigten oft starke Abweichungen von berechneten Werten.

McGuire hat theoretische Werte für Intensitäten und relative Energien von $L_{23}M\text{-}M^3$-Satelliten angegeben/McG75b/. Im Vergleich mit dem Experiment /WBS73/ wurden Abweichungen festgestellt, die auf starke Konfigurationswechselwirkung hindeuteten. Auch Rechnungen für die absoluten Energien der Diagrammlinien $L_{2,3}\text{-}M^2$ haben teilweise große Abweichungen von den experimentellen Daten gezeigt /La71a/.

Zur Berechnung nichtrelativistischer Energien von Atomen gibt es zwei Hartree-Fock-Programme. Das von Mayers und Mitarbeitern entwickelte Programm /MOB68/ wurde von Larkins zur Berechnung der Energien der Diagrammlinien benutzt /La71a/. Ein von Froese-Fischer /FF72/ entwickeltes Programm stimmt mit seinen Ergebnissen für die Diagrammlinien mit dem erstgenannten überein. In dieser Arbeit wurde das Programm von Froese-Fischer benutzt, das über eine Programmbibliothek verfügbar ist /CPC/.

Im folgenden Kapitel (Kap.1) werden die Grundlagen der Augerzerfälle sowie die Technik zur Berechnung der Übergangsenergien erläutert. Das 2. Kapitel gibt eine Übersicht über den experimentellen Aufbau, und im 3. Kapitel wird der Gang der Auswertung beschrieben. Es folgt eine kurze Übersicht über die gemessenen Spektren (Kap.4), und anschließend werden die Linien nach ihrer Intensität bei Anregung durch verschiedene Projektile und bei verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten in drei Typen eingeteilt (Kap.5). Das 6. Kapitel behandelt die Diagrammlinien und im Rahmen der Untersuchung der $L_{2,3}\text{-}M_1^2$-Übergänge auch Zweifach-Augerprozesse. Im 7. Kapitel werden die $L_{23}M\text{-}M^3$-Satelliten untersucht. Das 8. Kapitel dient dem Studium einer neuen Satellitengruppe, deren Intensität bei Anregung durch $He^+$ wesentlich stärker beobachtet wird, als bei Protonenstoß. Im letzten Kapitel schließlich werden die $L_{23}M_{23}^2\text{-}M_1^2M_{23}^2$-Satelliten behandelt.

# 1. Grundlagen

## 1.1 Phänomenologische Beschreibung des Zerfalls von Leerstellen in inneren Schalen

Für ein Atom, das in einer seiner inneren Schalen ionisiert wurde, gibt es zwei konkurrierende Zerfallsprozesse, den Röntgenübergang und den Augerzerfall. Beim Röntgenübergang wird die Leerstelle in der inneren Schale durch ein Elektron aus einer höheren Schale aufgefüllt und die Energiedifferenz als elektromagnetische Strahlung emittiert. Jedoch müssen die Auswahlregeln für Dipolstrahlung erfüllt sein:

$$\Delta J = 0,\pm 1; \quad J+J' \geq 1; \quad \pi_i = -\pi_f.$$

In LS-Kopplung bedeutet das:

$$\Delta L = 0,\pm 1; \quad L+L' \geq 1; \quad \Delta S = 0; \quad \pi_i = -\pi_f.$$

Im einfachsten Fall sind am Augerzerfall einer inneren Leerstelle zwei Elektronen beteiligt. Ein Elektron einer äußeren Schale füllt die Leerstelle auf und die dabei freiwerdende Energie wird auf ein zweites Elektron aus einer i.a. von der ersten verschiedenen äußeren Schale übertragen. Wenn diese Energie größer ist als die Bindungsenergie des Elektrons, verläßt es das Atom mit diskreter kinetischer Energie. Dieses Elektron ist das Augerelektron , das man spektroskopieren kann. Die Auswahlregeln sind in diesem Fall für das Gesamtsystem:

$$\Delta J = 0 \text{ und } \pi_i = \pi_f.$$

In LS-Kopplung bedeutet das:

$$\Delta L = 0; \Delta S = 0; \quad \pi_i = \pi_f.$$

Da man jedoch Bahndrehimpuls und Spin des emittierten Elektrons nicht mißt, muß man die Auswahlregeln umformulieren, so daß sie sich auf den Endzustand des zurückbleibenden Ions beziehen. In LS-Kopplung lauten sie folgendermaßen /RM72/:

1.) $\Delta S = \pm 1/2$

2.) a) Falls $L_i \neq 0$ und $L_f \neq 0$ :

$\Delta L$ beliebig, $\pi_i = \pm\pi_f$.

b) Falls $L_i \neq 0$ und $L_f = 0$, oder $L_i = 0$ und $L_f \neq 0$:
   α) Dann ist für $\pi_i = \pi_f$ : $\Delta L = 0,2,4,\ldots$
   ß) Dann ist für $\pi_i \neq \pi_f$ : $\Delta L = 1,3,5,\ldots$

Diese Auswahlregeln sind sehr viel weniger einschränkend als die optischen Auswahlregeln.

Im Folgenden wird für die Augerübergänge eine Nomenklatur benutzt, die nur für die oben beschriebenen normalen Augerübergänge und bestimmte einfache Satellitenübergänge üblich ist. Diese Nomenklatur wird hier etwas erweitert, um alle beobachteten Satelliten behandeln zu können und die Analogie zu den Abbildungen 1.1-1.3 beizubehalten. Im übernächsten Abschnitt werden dann die verschiedenen gebräuchlichen Schreibweisen behandelt.

Der hier beschriebene sogenannte normale Augerprozeß ist in Abb.1.1a veranschaulicht. Nach Anregung des Atoms durch schnelle Elektronen, bei der die Einfachionisation überwiegt, führen die Zerfälle dieser einfach ionisierten Zustände zu sehr intensiven Linien im Spektrum. Diese Linien bezeichnet man deshalb als normale Linien oder auch als Diagrammlinien. Die Nomenklatur in Abb. 1.1a trägt der Tatsache Rechnung, daß der Anfangszustand nach J aufspaltet in das $2p^{-1}_{1/2}$- und das $2p^{-1}_{3/2}$-Niveau. Die Aufspaltung liegt bei 2 eV. Das $2p^{-1}_{1/2}$-Niveau bezeichnet man auch als $L_2$-Niveau, das $2p^{-1}_{3/2}$-Niveau als $L_3$-Niveau. Wenn in dieser Arbeit alle normalen Augerzerfälle der 2p-Leerstelle gemeint sind, wird die Schreibweise $L_{2,3}$-MM benutzt. Sie ist nur als eine Abkürzung für "$L_2$-MM und $L_3$-MM" aufzufassen. Dagegen bedeutet der Doppelindex beim Endzustand wie z.B. 23 in $M_1M_{23}$, daß hier physikalisch eine Unterscheidung zwischen dem $3p^{-1}_{1/2}$- und dem $3p^{-1}_{3/2}$-Niveau nicht sinnvoll ist, weil nur die zusammengekoppelten Drehimpulse der beiden durch $M_1$ und $M_{23}$ charakterisierten Leerstellen gute Quantenzahlen sind. Der Endzustand wird dann vollständig spezifiziert durch zusätzliche Angabe des Gesamtbahndrehimpulses L (z.B. L = 1 $\hat{=}$ P) und der Multiplizität 2S+1 (z.B. S = 1): $M_1M_{23}(^3P)$. Damit lautet der Übergang in jj-Kopplung für den Anfangszustand und LS-Kopplung für den Endzustand:

$$L_2\text{-}M_1M_{23}(^3P)$$

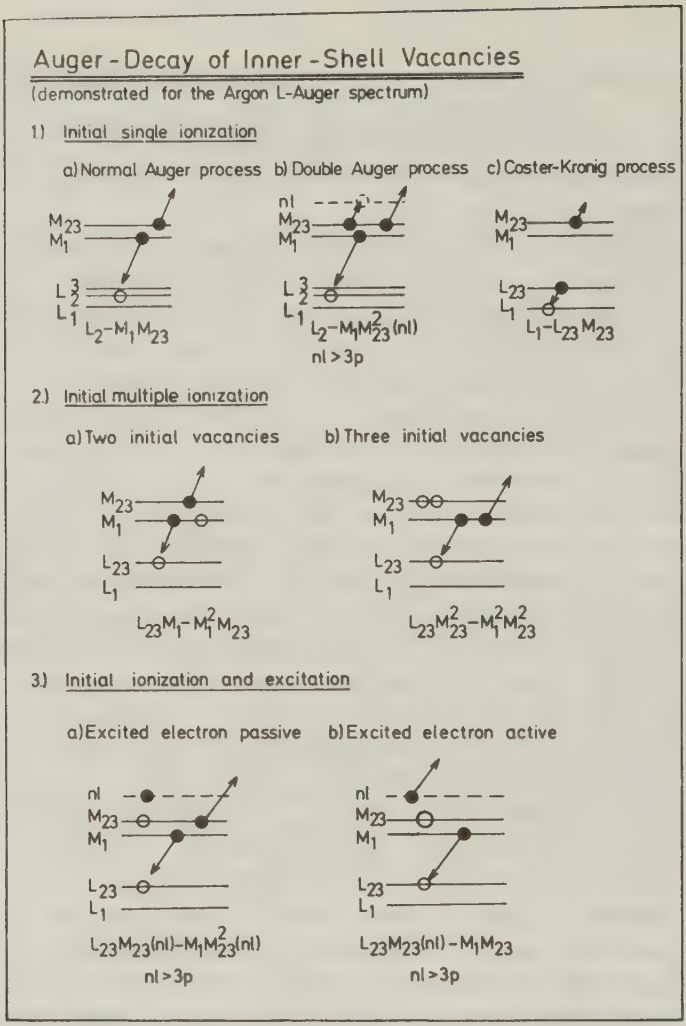



Abb. 1.1-1.3 Strahlungslose Zerfälle von Leerstellen in inneren Schalen. Die offenen Kreise deuten die im Anfangszustand vorhandenen Leerstellen an. Ein voller Kreis ohne Pfeil charakterisiert ein Elektron in einer Schale, die im Grundzustand des neutralen Atoms unbesetzt ist. Im Übrigen seien alle Schalen wie im Grundzustand besetzt. Die vollen Kreise mit Pfeilen beschreiben diejenigen Elektronen, die beim Zerfall "bewegt" werden.

Hier bedeutet also

$L_2$ die Konfiguration mit einem 2p-Loch und Gesamtdrehimpuls J=j=1/2

$M_1M_{23}$ die Konfiguration mit einem 3s-Loch und einem 3p-Loch

$(^3P)$ den Spin S=1 und den Bahndrehimpuls L=1 des Endzustandes. Dies kennzeichnet einen Term des Multipletts, das hier aus einem $^1P$- und drei $^3P$-Zuständen besteht.

Falls im Endzustand intermediäre Kopplung vorliegt, die Spin-Bahn-Wechselwirkung also den Multiplett-Term noch nach dem Gesamtdrehimpuls J sichtbar aufspaltet, muß das betreffende Niveau durch Angabe von J spezifiziert werden. Der Übergang wird dann vollständig beschrieben durch:

$$L_3\text{-}M_1M_{23}(^3P_2)$$

Wenn wie hier für Anfangs- und Endzustand verschiedene Kopplungsschemata gelten, spricht man von gemischter Kopplung.

In Abb. 1.1b und 1.1c sind zwei weitere Prozesse dargestellt, die als direkte Folge einer Einfachionisation einer inneren Schale auftreten, der Zweifach-Auger-Prozeß und der Coster-Kronig-Prozeß. Der Zweifach-Auger-Prozeß unterscheidet sich dadurch vom normalen Augerprozeß, daß die beim Auffüllen der inneren Schale freiwerdende Energie auf zwei Elektronen verteilt wird. Das eine Elektron wird nicht ionisiert, sondern nur auf ein freies Orbital angehoben, und das andere Elektron wird mit diskreter Energie emittiert. Es entstehen dadurch im Endzustand drei Löcher, und ein Elektron ist angeregt. Die Nomenklatur für einen solchen Übergang ist z.B.:

$$L_2\text{-}M_1M_{23}^2(4p)$$

Der Coster-Kronig-Übergang unterscheidet sich dadurch vom normalen Augerprozeß, daß mindestens eines der Löcher des Endzustandes in der gleichen Hauptschale ist wie die primäre Leerstelle, also z.B.:

$$L_1\text{-}L_{23}M_{23}(^3D_3)$$

Diese Übergänge liegen nicht in dem hier untersuchten

Bereich des Spektrums. Sie spielen jedoch eine wichtige Rolle, da sie als Folge einer Einfach-Ionisation zu doppelt-ionisierten Zuständen führen, deren weitere Zerfälle einen großen Teil des in dieser Arbeit gemessenen Spektrums einnehmen.

Als Satellitenprozesse bezeichnet man die Zweifach-Auger-Übergänge und die in Abb. 1.2 und 1.3 gezeigten Zerfälle. Am stärksten werden in den gemessenen Spektren die $L_{23}M\text{-}M^3$-Satelliten beobachtet. Der Zerfall ist in Abb. 1.2a dargestellt und ist im wesentlichen ein normaler Augerzerfall, der in Anwesenheit einer zweiten Leerstelle in der M-Schale abläuft. Diese zweite Leerstelle wurde in einem vorhergehenden Ionisationsprozeß geschaffen. Analog verläuft der Zerfall $L_{23}M^2\text{-}M^4$, bei dem im Anfangszustand ein Loch in der L-Schale und zwei zusätzliche Löcher in der M-Schale vorhanden sind (s. Abb. 1.2b). Die bisher betrachteten Satellitenlinien liegen i.a. bei kleineren Energien als die Diagrammlinien. Die Anfangszustände dieser Satelliten müssen in intermediärer Kopplung berechnet werden, während für die Endzustände noch gut LS-Kopplung gilt.

Ein weiterer Typ von Satelliten findet sich in Abb. 1.3a und 1.3b. Hier liegt neben der primären Ionisation in einer oder auch mehreren Schalen noch eine Anregung eines Elektrons in eine freie Bahn vor. Beim Zerfall eines solchen Zustandes nun gibt es zwei Möglichkeiten: das Elektron in der sonst unbesetzten Bahn bleibt während des Augerzerfalls als sogenanntes 'spectator electron' in seiner Bahn (Abb. 1.3a), oder es wird beim Zerfall emittiert (Abb. 1.3b). Die Schreibweisen für die Übergänge sind aus den vorangegangenen Beispielen verständlich. Diese Satelliten können auch oberhalb der Diagrammlinien im Spektrum liegen.

Zu Abb.1 ist zu bemerken, daß dies eine stark vereinfachende Darstellung ist, die davon ausgeht, daß man den Augerprozeß in der Näherung der voneinander unabhängigen Elektronen beschreiben kann. Außerdem wurden die Niveaus des Anfangszustandes und des Endzustandes nicht maßstäblich eingezeichnet. Ferner scheint die Abbildung anzudeuten,

daß man beim Übergang entscheiden kann, welches der beiden Löcher im Endzustand vom Auffüllen der Leerstelle in der inneren Schale herrührt, und welches durch Emission des Augerelektrons entstanden ist. Diese Unterscheidung ist natürlich nicht möglich.

## 1.2 Berechnung von Übergangsenergien

Für die Energiebilanz des Augerzerfalls ist zuerst zu klären, ob der Anregungsprozeß abgeklungen ist, wenn der Zustand zerfällt. Davon hängt es ab, ob man also nur den Übergang im isolierten Targetatom zu betrachten braucht oder das Projektil auch noch berücksichtigen muß. Zweitens muß abgeschätzt werden, ob man für den Anfangs- und Endzustand die gleichen Orbitale annehmen kann, oder ob die Lebensdauer ein Relaxieren der Orbitale zuläßt.

Eine charakteristische Zeit für den Anregungsprozeß ist die Durchflugszeit des Projektils durch das Targetatom. Da die Projektilgeschwindigkeiten zwischen 1,7 a.u. und 13,6 a.u. liegen, ergibt sich bei einem Radius des Argon-Atoms von etwa 2 a.u. als längste Zeit für die Wechselwirkung:

$$t_W = 6 \times 10^{-17} \text{ sec} .$$

Das ist kurz gegenüber den kürzesten in dieser Arbeit beobachteten Lebensdauern, die sich aus Linienbreiten von 300 meV ableiten zu:

$$\tau = 2 \times 10^{-15} \text{ sec} .$$

Es ergibt sich also im ungünstigsten Fall:

$$\frac{\tau}{t_W} = 30 .$$

Demzufolge braucht man zur Energiebilanz nur noch das Targetatom allein zu betrachten.

Nun ist abzuschätzen, ob der Zerfall so schnell abläuft, daß die Orbitale im Anfangs- und Endzustand dieselben sind. Dazu muß man die Zerfallszeit mit einer für die Elektronen der äußeren Schalen charakteristischen Relaxationszeit vergleichen. Diese Zeit sei hier über die Unschärferelation aus der Bindungsenergie berechnet. Mit der Bindungsenergie des 3p-Elektrons von ca. 3 a.u. ergibt sich:

$$T = 8 \times 10^{-18} \text{ sec} .$$

Folglich:

$$\frac{\tau}{T} = 250 .$$

Die äußeren Elektronen können sich also während des Augerzerfalls den sich ändernden Potentialen anpassen. Man darf also nicht dieselben Orbitale für Anfangs- und Endzustand voraussetzen.

Dennoch ist das "sudden model", in dem während des Augerzerfalls die Orbitale als eingefroren betrachtet werden, nützlich für schnelle Abschätzungen der Übergangsenergien. Die Übergangsenergie ergibt sich aus den Bindungsenergien der beteiligten Elektronen. Nach Koopmanns' Theorem /Koo33/ sind die Bindungsenergien im Fall der "frozen orbitals" gleich den Erwartungswerten $\varepsilon_{nl}$ des Fock-Operators für die einzelnen Orbitale nl. Das in dieser Arbeit benutzte Hartree-Fock-Programm /FF72/ liefert bei der Berechnung der totalen Energie eines Zustandes auch die Werte für $\varepsilon_{nl}$. Dann ist die Energie des Augerelektrons z.B. beim Zerfall $L_{2,3}$-$M_1M_{23}$ (Eine Unterscheidung der Zustände $L_2$ und $L_3$ ist in dieser Näherung nicht möglich):

$$E_{kin} = \varepsilon_{2p} - \varepsilon_{3s} - \varepsilon_{3p} \ .$$

Wenn der Übergang aber genügend langsam abläuft, so daß sich die Elektronen den geänderten Potentialen anpassen können, sind die Orbitale für den Anfangszustand und den Endzustand verschieden. Deshalb sind getrennte Rechnungen nötig. Man spricht dann von dem "adiabatischen Modell". Die Übergangsenergie ergibt sich in diesem Fall aus der Differenz der totalen Energien des Atoms im Anfangs- und Endzustand. Für den $L_2$-$M_1M_{23}(^1P)$-Übergang erhält man:

$$E_{kin} = E_{tot}( \ 1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^6 (^2P_{1/2}) \ ) - \\ -E_{tot}( \ 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p^5 (^1P) \ ) \ .$$

Es wurde für einige Edelgase gezeigt, daß die nach dem adiabatischen Modell berechneten Energien viel besser mit dem Experiment übereinstimmen /La71a,b/ als die nach dem "sudden model" berechneten Werte. Damit ist das adiabatische Modell gerechtfertigt. Die Rechnungen dieser Arbeit werden deshalb im adiabatischen Modell durchgeführt.

Die Berechnung der totalen Energien eines Atoms bedeutet die Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein Vielteilchensystem. Der Hamiltonoperator lautet in nichtrelativistischer Näherung, aber unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung:

$$H = H' + H_C + H_{SO}$$

wobei (atomare Einheiten werden benutzt mit $\hbar=e=m_e=1$ ) :

$H' = \sum_{i=1}^{N}(-\nabla_i^2/2 - Z/r_i)$ eine Summe von Einteilchen-Operatoren von wasserstoffähnlichen Systemen ist,

$H_C = \sum_{i<j}^{N} 1/r_{ij}$ die Coulombwechselwirkung der Elektronen untereinander beschreibt, und

$H_{SO} = \sum_{i}^{N} \xi(r_i)\cdot(\vec{l}_i \cdot \vec{s}_i)$ der Operator der Spin-Bahn-Wechselwirkung ist,

mit $\xi(r_i) = 1/2r_i \cdot \partial V(r_i)/\partial r_i$.

Dieses Vielteilchenproblem ist nicht exakt lösbar. Man setzt daher die Wellenfunktion als antisymmetrisiertes Produkt von Einteilchenwellenfunktionen an. Das bedeutet, daß man die Elektronen als unabhängige Teilchen betrachtet. Dieser Ansatz führt auf ein System von Gleichungen für die Einteilchenwellenfunktionen, die Hartree-Fock-Gleichungen /Sla60/. Die Hartree-Fock-Gleichungen lassen sich iterativ lösen, wenn man vernünftige Anfangswellenfunktiogen für die einzelnen Elektronenschalen vorgibt. Man nimmt dazu meist analytische wasserstoffähnliche Wellenfunktionen, die man für die aktuelle Kernladung abzüglich einer Abschirmung durch weiter innen liegende Elektronen berechnet. Die Geschwindigkeit und die Güte der Konvergenz hängt stark von dieser Wahl der Anfangswellenfunktionen ab. Es wurden in dieser Arbeit zuvor berechnete Wellenfunktionen von Chrom als Anfangsdaten für die Berechnung aller Argonkonfigurationen mit gutem Erfolg benutzt. Die Konfiguration wird durch Angabe der Besetzungszahlen der Einteilchenorbitale nl spezifiziert.

In dem hier verwendeten Programm /FF72/ geht man davon aus, daß $H_{SO}$ gegenüber $H_C$ vernachlässigbar ist. Dies führt dazu, daß der Hamiltonoperator außer mit $J^2$ und $J_z$ auch mit $L^2$ und $S^2$ vertauscht, so daß sich die Gesamtwellenfunktionen

und Eigenwerte nach L, S, J und $M_J$ klassifizieren lassen. Dies ist das LS-Kopplungsschema. Die Energien der einzelnen Terme eines Multipletts werden durch L und S bestimmt und sind von J unabhängig. Man kann die Energien der Terme als Summe aus einer mittleren Energie $E_{av}$ und einer Reihenentwicklung schreiben, die eine Kombination von Slaterintegralen ist /Sla60/:

$$E(L,S) = E_{av} + \sum_{k=0}^{\infty}(a_k F^k + b_k G^k) \quad .$$

Die Schwerpunktsenergie $E_{av}$ des Multipletts ist der Erwartungswert eines zentralsymmetrischen Hamiltonoperators $H_Z$, der aus H' und denjenigen Anteilen $U(r_i)$ von $H_C$ besteht, die Zentralkraftcharakter haben:

$$H_Z = H' + \sum_{i=1}^{N} U(r_i).$$

$E_{av}$ hängt nicht von L oder S ab, sondern wird nur von der Konfiguration bestimmt. Die Slaterintegrale $F^k$ und $G^k$ (siehe /Sla60/) sind Radialmatrixelemente, die aus einer Entwicklung von $H_C$ nach Legendre- Polynomen hervorgehen. Die Koeffizienten $a_k$ und $b_k$ enthalten die dazugehörigen Integrale über die Winkelanteile und hängen davon ab, zu welchen Gesamtdrehimpulsen L bzw. S die Drehimpulse der einzelnen Elektronen gekoppelt werden. Damit wird durch die $a_k$ und $b_k$ der Term charakterisiert. Die Reihenentwicklung bricht stets nach wenigen Gliedern ab. Die $a_k$ und $b_k$ hängen von der jeweiligen Konfiguration ab und sind bei /Sla60/ in Tab.21a tabelliert. Die Stärke der Termaufspaltung hängt von der Größe derjenigen Anteile $H'_C$ von $H_C$ ab, die keinen Zentralkraftcharakter besitzen:

$$H'_C = H_C - \sum_{i=1}^{N} U(r_i)$$

Für abgeschlossene Schalen gilt L=S=0 und $E=E_{av}$.

Für den Fall, daß $H_{SO} \gg H'_C$ gilt, sind die $j_i$, J und $M_J$ gute Quantenzahlen. Dies ist das jj-Kopplungsschema. Die Energie ist dann für N Elektronen:

$$E(j_1, \ldots, j_N) = E_{av} + 1/2 \sum_{i=1}^{N}(j_i(j_i+1) - l_i(l_i+1) - 3/4)\cdot\zeta_i$$

$\zeta_i$ ist das Radialintegral von $\xi(r_i)$.

Oft tritt jedoch der Fall ein, daß $H'_C$ und $H_{SO}$ von vergleichbarer Größe sind. In diesem Fall sind nur noch J, $M_J$ und die Parität gute Quantenzahlen. Man geht dann so vor, daß man die Term-Energien in LS-Kopplung ausrechnet und

den Beitrag von $H_{SO}$ durch Diagonalisierung /CS70/ berücksichtigt.

In den verschiedenen Kopplungsschemata werden unterschiedliche Notationen für die Zustände benutzt. In LS-Kopplung bezeichnet man einen Term durch $^{2S+1}L$, während man in jj-Kopplung z.B. für zwei Elektronen schreibt: $(j_1,j_2)$. Ist weder die Spin-Bahn-Aufspaltung, noch die elektrostatische Aufspaltung vernachlässigbar, so beobachtet man eine Aufspaltung nach dem Gesamtdrehimpuls J (s. Abb.1.4). Man spricht dann von intermediärer Kopplung.

In der intermediären Kopplung benutzt man meist noch die Notation der LS-Kopplung, spezifiziert aber den Gesamtdrehimpuls J:

$$M_{23}^2(^3P_0).$$

Genaugenommen haben jedoch L und S hier keine Bedeutung mehr, da dieser Zustand mit J=0 auch Beimischungen des $M_{23}^2(^1S_0)$-Zustandes enthält. Sind diese Beimischungen anderer LS-Terme klein, so wird die Klassifikation nach der stärksten Komponente beibehalten. Bei starker Mischung jedoch wird der Term nur noch durch J und die Term-Energie bezeichnet /McG75b/. Dabei erhält der Term höchster Energie mit bestimmtem J die Bezeichnung J a (z.B. 1/2 a), der nächstniedrigere J b (also 1/2 b) usw..

Komplizierter wird die Kopplung von mehr als zwei Drehimpulsen. Das sei hier in LS-Kopplung gezeigt. Koppelt man in LS-Kopplung mehrere Drehimpulse zusammen, so geht man sukzessive vor, z.B.:

$$((3p^3)^4S,4p)^3P\ ,$$

meist geschrieben als

$$(3p^3)^4S(4p)^3P.$$

Bei drei und mehr Elektronen gibt es stets mehrere Terme, die gleichen Gesamtspin und Gesamtdrehimpuls haben, aber durch unterschiedliche Kopplung der Drehimpulse entstanden sind wie

$$(3p^3)^4S(4p)^3P$$
$$(3p^3)^2D(4p)^3P$$

Die Energien dieser Terme lassen sich nicht mehr als eine Summe von $E_{av}$ und Slaterintegralen ausdrücken. Man muß hier die Energiematrix echt diagonalisieren. Die nichtdiagonalen Elemente lassen sich wieder als

$$\sum_{k=0}^{\infty}(a_k F^k + b_k G^k)$$

schreiben, wobei die $a_k$ und $b_k$ aus Tab. 21a in /Sla60/ zu entnehmen sind.

Aus der Diagonalisierung der Energiematrix folgt, daß eine Klassifikation der Terme nach der genealogischen Abstammung nicht mehr sinnvoll ist, weil die Terme mischen. Die Mischung ist in den hier behandelten Fällen oft so stark, daß ein Term oft noch zu etwa 50% Anteile von anderen Termen enthält. Eine kleine Änderung in den Werten der berechneten Slaterintegrale oder in $E_{av}$ kann dann zur Folge haben, daß bei einer anderen Diagonalisierung die Terme mit gleichem L und S zwar wieder bei ungefähr den gleichen Energien liegen, aber dann von anderer genealogischer Abstammung sind. Das muß man berücksichtigen, wenn man verschiedene Rechnungen vergleicht. Die Klassifikation nach der genealogischen Abstammung ist nur für schwache Mischung der Terme physikalisch sinnvoll.

In Fig. 1.4 werden am Beispiel der Konfiguration $2p^{-1}3s^{-1}$ die typischen Multiplettaufspaltungen für verschieden starke elektrostatische Wechselwirkung und Spin-Bahn-Wechselwirkung gezeigt. Falls $H_{SO} = 0$ gilt, liegt reine LS-Kopplung vor. Man erhält dann die Niveaus $^1P$ und $^3P$. Die Aufspaltung wurde mit realistischen Werten für die Slaterintegrale berechnet. In einer zweiten Rechnung wurde angenommen, daß eine schwache Spin-Bahn-Wechselwirkung vorliegt. Nun spaltet das $^3P$-Niveau nach J auf. Es liegt jetzt intermediäre Kopplung vor. In der nächsten Spalte wurde ein realistischer Spin-Bahn-Parameter berücksichtigt, der um einen Faktor 10 größer ist, als im vorhergehenden Fall, und nun mit der elektrostatischen Aufspaltung vergleichbar ist. Die Aufspaltung nach J ist von gleicher Größe wie die Aufspaltung nach L und S im Fall

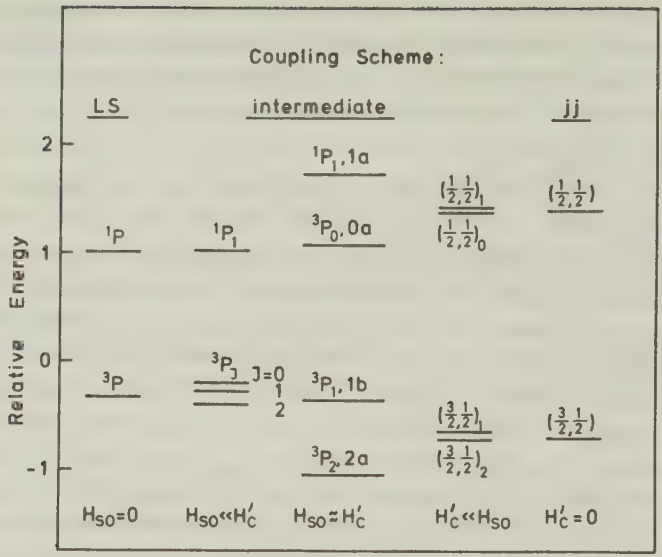



Abb. 1.4 Termaufspaltung der Konfiguration $2p^{-1}3s^{-1}$. Für die Fälle $H_{SO}=0$, $H_{SO}\approx H_C'$ und $H_C'=0$ wurden realistische Daten für Spin-Bahn-Parameter bzw. Slaterintegrale gewählt. Für $H_{SO}\ll H_C'$ bzw. $H_C'\ll H_{SO}$ wurden der Spin-Bahn-Parameter bzw. das Slaterintegral zehnmal kleiner angenommen.

$H_{SO}=0$. Deshalb wird hier zusätzlich zur Bezeichnung $^{2S+1}L_J$ die Nomenklatur eingeführt, die die Niveaus nur nach J und Energielage einteilt. Läßt man die elektrostatische Wechselwirkung kleiner werden, so besteht das Termschema aus zwei Doubletts. An dem Grenzfall $H_C'=0$ erkennt man, daß die Doubletts durch die Gesamtdrehimpulse $(j_{2p},j_{3s})$ der einzelnen Elektronen spezifiziert werden.
In der Abb. 1.4 wurde die Schwerpunksenergie $E_{av}$ des jeweiligen Multipletts subtrahiert.

Im gemessenen Spektrum liegt der Fall $H_{SO}\ll H_C'$ für die meisten Endzustände vor, während für die Anfangszustände $H_{SO}\approx H_C'$ gilt. Eine Ausnahme bilden die Anfangszustände für

die Diagrammlinien. Es sind Einteilchenzustände $2p^{-1}$, die in LS-Kopplung die Energie $E=E_{av}$ besitzen und deshalb nur nach J aufspalten.

Bisher wurde noch nicht berücksichtigt, daß der Hamiltonoperator $H'' = H' + H_C$ auch Matrixelemente zwischen verschiedenen Konfigurationen besitzt. Diese Matrixelemente sind von Null verschieden zwischen Konfigurationen, die sich um maximal zwei Elektronen voneinander unterscheiden. Man spricht dann von Konfigurationswechselwirkung. In LS-Kopplung können nur Konfigurationen mit demselben L und S miteinander mischen. Die Konfigurationswechselwirkung ist ein Ausdruck des Vielteilchencharakters der wahren Wellenfunktion, die hier durch ein antisymmetrisiertes Produkt von Einteilchenwellenfunktionen approximiert wird. Die Konfigurationswechselwirkung kann für einige der untersuchten Konfigurationen die Größenordnung der anderen Aufspaltungen erreichen. Die Berechnung der Konfigurationswechselwirkung ist sehr kompliziert und kann im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt werden.

Die Vernachlässigung der relativistischen Wechselwirkungen zwischen Spin und dem Bahndrehimpuls eines zweiten Elektrons und zwischen den Spins untereinander ist gerechtfertigt. Die Radialmatrixelemente $M^0(nl,nl)$, die zur Berechnung der entsprechenden Energieverschiebungen benutzt werden /Ma47/, sind in allen Fällen um Größenordnungen kleiner als die Spin-Bahn-Parameter.

## 1.3 Übersicht zur üblichen Nomenklatur

Im vorhergehenden Kapitel wurde gezeigt, daß die in dieser Arbeit betrachteten Augerübergänge durch die Angabe des Anfangs- und Endzustands des Atoms bzw. Ions vollständig beschrieben werden.

Für einen normalen Augerübergang, z.B.

1.) $L_2\text{-}M_1M_{23}(^3P)$

wäre die ausführlichste Notation:

$$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^6 (^2P_{1/2})\text{-}1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p^5 (^3P)$$

Üblicherweise läßt man alle abgeschlossenen Unterschalen weg:

2.) $2p^5(^2P_{1/2})\text{-}3s3p^5(^3P)$

In dieser Schreibweise lassen sich alle Augerübergänge am klarsten darstellen, insbesondere jene mit einem Elektron in einer höheren Schale:

$$2p^5 3p^5 4s(^2D)\text{-}3p^3 4s(^3S)$$

Oft gibt man aber noch die gefüllten Unterschalen zwischen unaufgefüllten an, um Mißverständnissen vorzubeugen:

$$2p^5 3s^2 3p^5 4s(^2D)\text{-}3p^3 4s(^3S)$$

Eine andere Nomenklatur geht daraus hervor, daß man nur die Leerstellen angibt, und zwar in eckigen Klammern:

3.) $[2p](^2P_{1/2})\text{-}[3s][3p](^3P)$

Den oben angegebenen 'spectator'-Übergang kann man nur angeben, wenn man ein extra Zeichen für ein besetztes Orbital einführt, nämlich die runden Klammern:

$$[2p][3p](4s)\ ^2D - [3p]^3(4s)\ ^3S$$

Die bisher aufgeführten Nomenklaturen sind in der Literatur üblich. Da aber die Nomenklatur 1 besonders anschaulich ist, wurde sie hier auch auf Übergänge ausgedehnt, die Elektronen in höheren Bahnen enthalten:

$$L_{23}M_{23}4s(^2D)\text{-}M_{23}^3 4s(^3S).$$

## 2. Versuchsaufbau

### 2.1 Streuapparatur

Für die Messungen wurde eine Streukammer benutzt, die in anderen Arbeiten schon eingehend beschrieben wurde /SSZ74/, /Sto71a,b/ (s. Abb. 2.1). In dieser Streukammer wird der Projektilstrahl mit einem Targetgasstrahl gekreuzt. Der Projektilstrahl wird nach Durchqueren der Meßkammer in einem Faradaybecher aufgefangen und der Strom zu Normierungszwecken aufintegriert. Ein 400 kV Van-de-Graaff-Generator AN 400 (High Voltage Engeneering) lieferte die Projektile $H^+$ und $He^+$ bei Energien von 100 bis 500 keV bzw. 300 bis 500 keV (s. Abb 2.2). Ein $15^o$-Ablenkmagnet sorgt für die Massenseparation der Projektile. Anschließend wird der Strahl durch eine Quadrupollinse auf das Streuzentrum fokussiert. Die Strahlströme lagen bei 10 $\mu$A im Faradaybecher. Bei den Messungen mit Elektronenanregung wurde die bereits beschriebene Elektronenkanone /Di76/ mit 2,5 kV Beschleunigungsspannung benutzt. Es handelt sich dabei um ein Bildröhrensystem für Schwarzweiß-Fernseher (Telefunken). Die Elektronenkanone wurde zusammen mit einem gegenüberliegenden Faradaybecher um $90^o$ zum Ionenstrahl versetzt an der Kammer montiert.

Das Streuzentrum liegt 1-2 mm unterhalb der Gasdüse, die von der Mitte des Kammerdeckels dicht an den Projektilstrahl heranreicht. Der genaue Abstand kann durch eine Höheneinstellung an der Düse so eingestellt werden, daß möglichst hoher Druck im Streuzentrum herrscht, trotzdem aber die Düse noch genügend weit vom Strahl entfernt ist, um Aufladungseffekte minimal zu halten. Der Targetgasdruck im Streuzentrum betrug ca. $3 \times 10^{-3}$ Torr /Sto71a/. Der Restgasdruck in der Kammer lag bei etwa $10^{-6}$ Torr. Eine 3000 l Öldiffusionspumpe erzeugte in der Kammer ein Vakuum von $5 * 10^{-5}$ Torr während der Messungen, d.h. bei laufendem Targetgasstrahl.

Um das Streuzentrum herum läßt sich ein Elektronenspek-

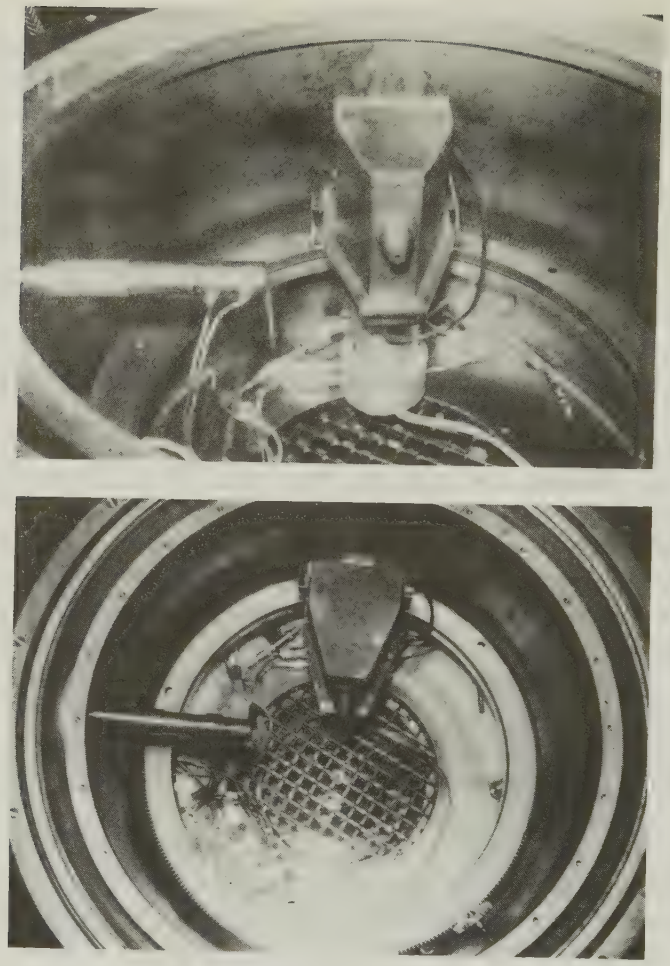


Abb. 2.1 Streukammer mit Elektronenspektrometer. Links ist das Kollimatorsystem für den Projektilstrahl vom Beschleuniger zu sehen. Am Kammerboden ist der Pumpenanschluß unter dem Durchbruch in der μ-Metallabschirmung sichtbar. Unterhalb des Elektronenspektrometers sitzt das Gehäuse für den Sekundärelektronenvervielfacher und das etwas größere Gehäuse für den Vorverstärker.

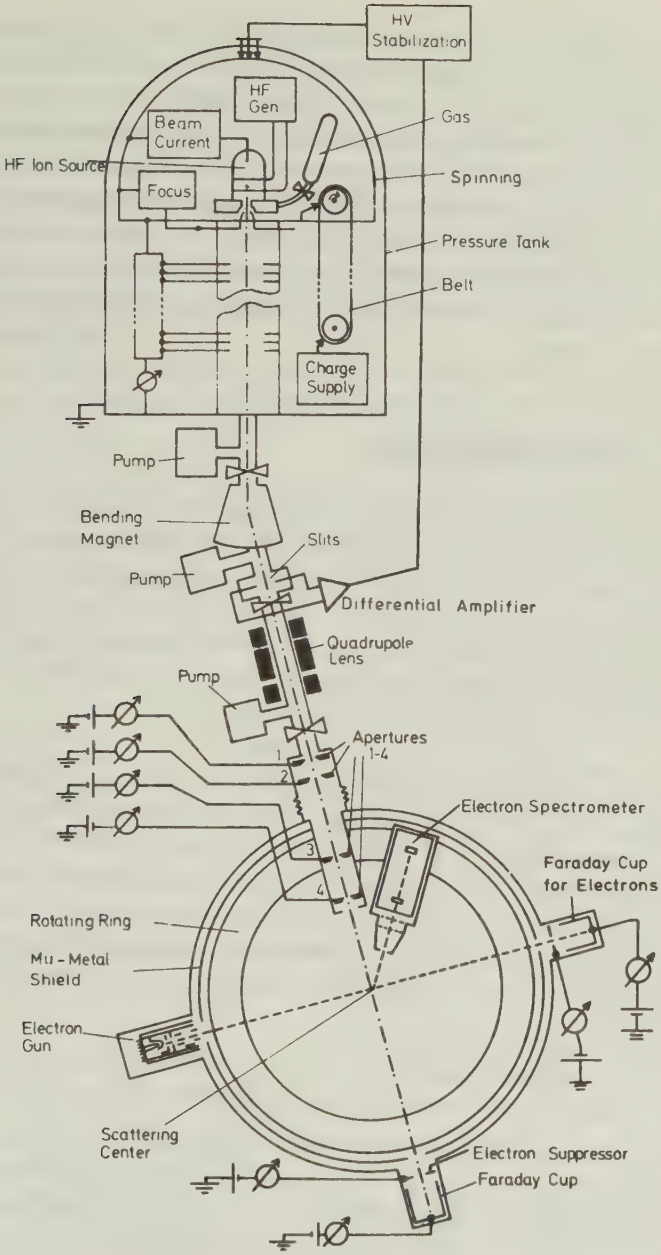



Abb. 2.2 Beschleuniger, Strahlführungssystem und Meßkammer (nicht maßstabsgerecht)

trometer /Ga74/ im Winkelbereich von $20^{o}$ bis $155^{o}$ schwenken (s. Abb. 2.1). In dieser Arbeit wurde vorwiegend unter $150^{o}$ gemessen, weil dort die Elektronen mit kontinuierlicher Energieverteilung am wenigsten zum Spektrum beitragen und die diskreten Strukturen am deutlichsten zu beobachten sind. Bei kleineren Winkeln würde die Statistik des intensiven kontinuierlichen Spektrums die diskreten Linien stärker überlagern. Um dann klar getrennte Linien zu erhalten, wären höhere Zählraten und damit wesentlich längere Meßzeiten nötig.

## 2.2 Elektronenspektrometer

Zur Energieanalyse der vom Streuzentrum emittierten Elektronen wurde das von Gabler /Ga74/ beschriebene elektrostatische Parallel-Platten-Spektrometer benutzt. Die Elektronen treten unter einem Winkel von $45^{o}$ in ein Ablenkfeld ein, das zwischen zwei parallelen Platten liegt. Wenn zwischen der Elektronenenergie $E_s$ und der Spannung $U_s$ zwischen den Platten die Beziehung:

$$E_s = k \cdot e \cdot U_s \qquad \text{mit } k=0{,}6$$

besteht, können die Elektronen, die durch eine Blende in der Grundplatte in das Feld eingetreten sind, das Ablenkfeld auch wieder durch eine zweite Blende in der Grundplatte verlassen und vom Sekundärelektronenvervielfacher zu Pulsen verstärkt werden. Das Auflösungsvermögen A eines solchen Spektrometers bestimmt sich in erster Näherung aus der Blendenschlitzweite $\Delta L$ und dem Abstand der Blenden L zu

$$\frac{\Delta E_s}{E_s} = A \approx \frac{\Delta L}{L} .$$

Damit ist das Auflösungsvermögen unabhängig von der Elektronenenergie, bzw. die instrumentelle Breite $\Delta E_s$ ist der Elektronenenergie proportional. Um eine sehr geringe instrumentelle Breite bei guter Transmission zu erreichen,

werden die Elektronen vor Eintritt in das Ablenkfeld abgebremst. Dazu dienen zwei Abbremsnetze im Kollimator des Spektrometers. Das erste Netz liegt wie das Spektrometergehäuse auf Erdpotential. An das zweite Netz wird eine negative Spannung $U_v$ zum Abbremsen der Elektronen gelegt, die gleichzeitig auch an der unteren Platte des Plattenkondensators liegt. Hält man die Spannungsdifferenz zwischen den Platten konstant und variiert man die Abbremsspannung $U_v$, so bleibt in den gemessenen Spektren die instrumentelle Breite konstant.

Bei fester Auflösung hängt die Transmission des Spektrometers vom Abstand der Abbremsnetze ab. Abb. 2.3 zeigt die Ergebnisse dieser Meßreihe. Das erste Abbremsnetz wurde daraufhin auf den optimalen Abstand von 4 mm relativ zum Ende des Eintrittskollimators fixiert.

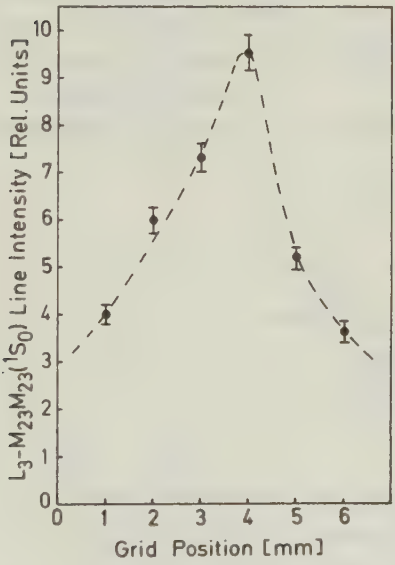



Abb. 2.3 Optimierung des Abstands der Abbremsnetze. Auf der Abszisse ist die Lage des ersten Netzes relativ zum Ende des Eintrittskollimators angegeben.

Die instrumentelle Breite läßt sich einmal durch die Stärke der Abbremsung, zum anderen durch Verkleinerung der Blendenschlitzweiten $\Delta L$ verringern. Beide Parameter beeinflussen aber die Transmission in verschiedener Weise. Abb. 2.4 zeigt die Abhängigkeit der Intensität und der Halbwertsbreite der $L_3$-$M_{23}^2(^1S_0)$-Linie von der Blendenschlitzweite $\Delta L$ und der Energie der Elektronen nach Abbremsung: $E_s = E_e - e \cdot U_v$ . Als Kompromiß mit guter Auflösung bei guter Transmission wurde $\Delta L$ = 1 mm und $E_s$ = 5 eV für

die Messungen gewählt. Teilweise wurde aber auch weniger stark abgebremst, um bei wenig intensiven Spektren die Transmission zu erhöhen.

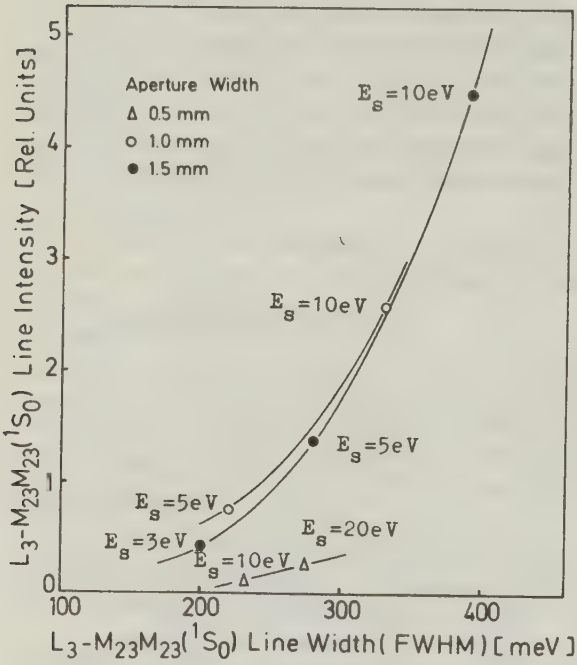



Abb. 2.4

Optimierung der Blendenschlitzweite und der Abbremsspannung bezüglich guter Auflösung und guter Transmission. Parameter sind die Blendenschlitzweite und die Energie $E_s$ der Elektronen nach der Abbremsung.

## 2.3 Elektronischer Aufbau

Die Elektronenspektren wurden mit der schon früher beschriebenen Elektronik aufgenommen /Sto71a,b/. Ein PDP11/20 Prozeßrechner steuert die Spannungen für das Spektrometer und sammelt die Pulse (s. Abb. 2.5). Die Spannungen für das Spektrometer werden über einen DAC-Ausgang (Digital-to-Analog-Converter) des Rechners eingestellt, an den ein hochstabilisiertes steuerbares Netzgerät N64 angeschlossen ist. Dieses Netzgerät gibt die an der Grundplatte des Spektrometers liegende Spannung $U_v$ ab, die über ein 6-stelliges Digitalvoltmeter gemessen wird. Die Ablenkspannung U und eine weitere Spannung B zur Diskrimi-

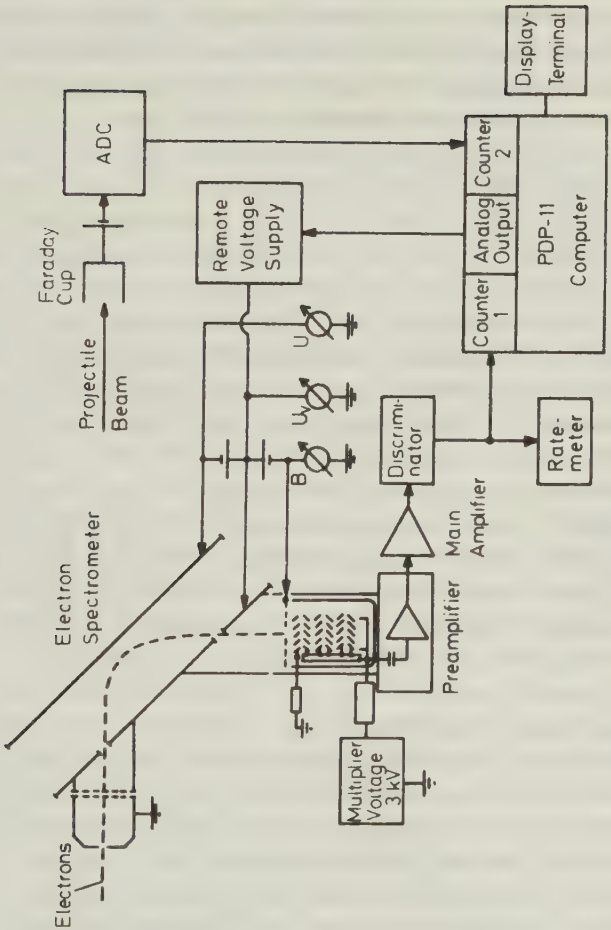



Abb. 2.5 Elektronischer Aufbau und Datenerfassungssystem

nierung von Streuelektronen werden durch Batterien mit Bezugspunkt $U_v$ erzeugt. Durch den Einsatz von Batterien anstelle von netzbetriebenen Spannungsquellen kann man Brummspannungen, die durch jedes netzbetriebene Gerät erzeugt werden, kleiner als 10 mV halten. Das ist eine entscheidende Vorausstzung für sehr hohe Auflösung. Die Spannungen werden so eingestellt, daß bei einer Sollenergie der Elektronen $E_e$ und Abbremsung auf die Energie $E_s$ gilt:

$$U = 1/e \cdot ( E_e - E_s (1-k) )$$

$$U_v = 1/e \cdot ( E_e - E_s )$$

$$B \approx 1/e \cdot ( E_e - E_s (1-k/2) )$$

k ist der Spektrometerfaktor, der das Verhältnis von Ablenkspannung zu Sollenergie der Elektronen angibt. Für das hier benutzte $45^o$-Parallel-Platten-Spektrometer gilt theoretisch k=0,6, Experimentell gilt k=0,600±0,001 /Ga74/. Auch die Spannung U wird durch ein 6-stelliges Digitalvoltmeter überprüft. Die Elektronen treffen nach Passieren des Spektrometers hinter dem Diskriminatornetz, das auf dem Potential B liegt, auf den Sekundärelektronenvervielfacher auf. Nach Verstärkung um einen Faktor $10^6$ bis $10^7$ erzeugt die Elektronenlawine einen Spannungsabfall am Arbeitswiderstand von 10 kΩ. Dieser Puls gelangt auf den Eingang eines schnellen Vorverstärkers, der Zählraten bis 5 MHz verarbeiten kann. Der Puls wird außerhalb der Kammer durch einen Hauptverstärker verstärkt, gegen Rauschen diskriminiert und auf einen Zählereingang des Rechners gegeben. Die Zählraten werden auf den Projektilstrom normiert. Dazu wird der Strom, der in den Faradaybecher fließt, über einen ADC (Analog-to-Digital-Converter) digitalisiert und ebenfalls dem Rechner eingegeben. Nach Erreichen einer vorgegebenen Pulszahl, die einer definierten Zahl von Projektilen entspricht, werden die Spannungen am Spektrometer weitergeschaltet und die Elektronenpulse in den nächsten Kanal eingezählt. Das Spektrum wird während des Sammelns auf einem Sichtgerät gezeigt.

## 3. Auswertung der Spektren

### 3.1 Behandlung der Rohdaten

Die mit hoher Auflösung gemessenen Augerspektren zeigten Energieverschiebungen von ca. 1eV gegenüber den bekannten Spektren/WBS73/,/MS68/. Es wurde beobachtet, daß diese Verschiebungen verschwanden, wenn die Gasdüse vom Streuzentrum weggefahren wurde. Offenbar handelt es sich um eine Aufladung der Gasdüse, die ein Feld im Streuraum erzeugt. Aus Intensitätsgründen mußte die Gasdüse aber möglichst nahe an den Projektilstrahl herangefahren werden. Deshalb wurden die Spektren nachträglich auf die sehr schmale $L_{23}M_{23}(^3D_3)$-$M_1^2M_{23}(^2P)$-Linie geeicht, deren Lage in der Arbeit von Werme und Mitarbeitern zu (160,64±0,01) eV angegeben wird /WBS73/. Dieser Wert ging aus einer sorgfältigen Absoluteichung basierend auf Daten aus optischen Messungen hervor.

Das gesamte $L_{2,3}$-Augerspektrum wurde im Bereich von 145 eV bis 210 eV in mehreren Intervallen zu je 10 eV und mit einem Überlapp von je 1 eV aufgenommen. Energieverschiebungen dieser Teilspektren untereinander waren in der Größenordnung von 10 meV. Anhand eines hochaufgelösten Gesamtspektrums von 120 bis 250 eV (s. Abb. 3.1), das nur mit geringer Statistik aufgenommen wurde, konnten die Energien der Teilspektren überprüft und korrigiert werden.

Auch der Verlauf des kontinuierlichen Spektrums der durch direkten Stoß emittierten Elektronen konnte durch Interpolation anhand des Gesamtspektrums bestimmt werden (s. Abb. 3.1). Es wurde auf der nieder- und hochenergetischen Seite der Augerlinien eine Parabel an das kontinuierliche Spektrum angepaßt.

Nach Subtraktion des kontinuierlichen Anteils wurden die Spektren mit einem Fitprogramm ausgewertet. Bei der $L_{2,3}$-$M_{23}^2$-Liniengruppe mußte noch ein zusätzlicher kontinuierlicher Untergrund vor dem Fit abgezogen werden.Es handelt sich dabei um eine Vielzahl kleiner überlappen-

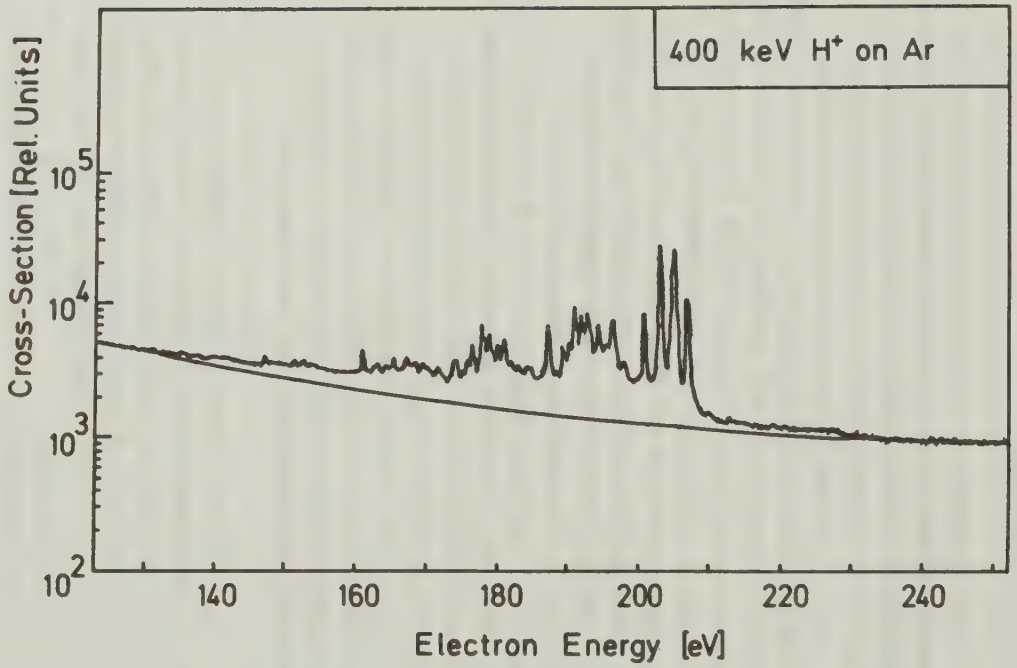



Abb. 3.1 Gesamtspektrum mit interpoliertem kontinuierlichem Spektrum. Spektren dieser Art wurden bei geringer Statistik zum Zwecke der Energiekalibrierung und für die Bestimmung des kontinuierlichen Spektrums aufgenommen.

der Linien der Art $LM(nl)-M^3(nl)$, die zu einem quasikontinuierlichen Spektrum führen (s. Abb. 8.1). In den übrigen Teilen des Spektrums war eine solche Trennung zwischen echten Linien und quasikontinuierlichen Verteilungen nicht möglich.

## 3.2 Fitmethode

Die gemessenen Spektren wurden nach Subtraktion des kontinuierlichen Spektrums mit einem Fitprogramm ausgewertet, das speziell für Prozeßrechner wie die hier benutzten PDP11-Rechner mit Kernspeichern von mindestens 40 K-Bytes und einem Datensichtterminal konzipiert ist /SR75/. Der Vorteil der Arbeit am Prozeßrechner mit Datensichtgerät lag in der Schnelligkeit, mit der Korrekturen an den Größen vorgenommen werden konnten, die nicht vom Fitprogramm angepaßt wurden. Außerdem war die sofortige optische Überprüfung des Fitergebnisses sehr hilfreich. Ein weiterer Vorteil war die Möglichkeit, verschiedene Spektren auf dem Sichtschirm vergleichen zu können. Da es sich bei den vorliegenden Spektren um stark überlappende Liniengruppen handelt, war die optische Überprüfung der Fitergebnisse im Zusammenhang mit einem $\chi^2$-Test nötig, um reproduzierbare Ergebnisse zu erhalten.

Die Kurven, die an die gemessenen Spektren angepaßt wurden, entstanden durch Faltung von Lorentz-Verteilungen mit einer numerisch vorgegebenen Spektrometerfunktion /Di76/. Die benutzte Spektrometerfunktion (s. Abb. 3.1) wurde aus dem Spektrum selbst bestimmt. Für eine Linie mit sehr kleiner natürlicher Linienbreite kommt die gemessene Verteilung der wahren Spektrometerfunktion sehr nahe. Es wurde deshalb die gemessene $L_{23}M_{23}(^3D_3)-M^3_{23}(^2P)$-Linie benutzt, um unter Berücksichtigung der theoretischen Linienbreite von 9,4 meV /McG75b/, /CC74/, eine Spektrometerfunktion zu konstruieren. Theoretisch ergibt sich

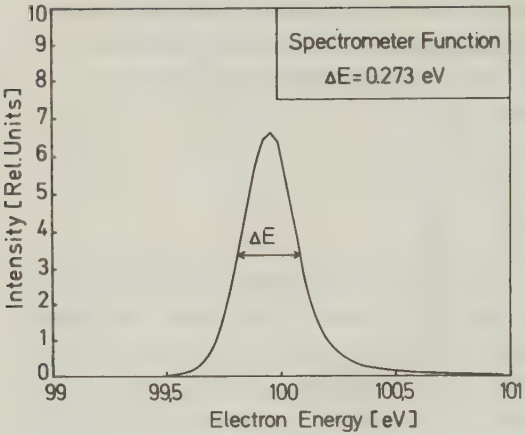



Abb. 3.2

Die Spektrometerfunktion bei relativ schlechter Auflösung. Die Halbwertsbreite beträgt hier $\Delta E$ = 273 meV. Bei optimaler Auflösung wurde $\Delta E$ = 164 meV erreicht.

aus dem Auflösungsvermögen des Spektrometers von 2,6% /Ga74/ bei Abbremsung der Elektronen auf 5 eV eine instrumentelle Breite von 130 meV. Dagegen ist die natürliche Breite der Linie von 9,4 meV vernachlässigbar. Die genaue Form der Flanken der Spektrometerfunktion wurde durch Fit der intensiveren und isoliert stehenden $L_3$-$M_{23}^2(^1S_0)$-Linie bestimmt. Die so konstruierte Spektrometerfunktion (s. Abb. 3.2) konnte für alle gemessenen Spektren verwendet werden. Sie mußte lediglich in der Breite durch Stauchen um Faktoren zwischen o,6 und 1,0 verändert werden, um sie der bei dem betreffenden Spektrum erreichten Auflösung anzupassen.

Das Fitprogramm behandelt nur die Höhen der Linien als variable Größen. Das Problem reduziert sich dadurch auf die Lösung eines linearen Gleichungssystems. Die Koeffizientenmatrix des Gleichungssystems ist symmetrisch, und das Problem wird deshalb nach dem Verfahren von Cholesky gelöst /Lu69/. Nur durch die Einschränkung auf die Höhen als Fitparameter war eine schnelle Auswertung am Prozeßrechner möglich. Die Energielagen und natürlichen Linienbreiten mußten dem Fitprogramm eingegeben werden. Diese Parameter wurden im Laufe mehrerer Fits iterativ optimiert.

Die Güte eines Fits konnte einmal optisch am Sichtgerät überprüft werden, zum anderen mit dem Programm durch einen $\chi^2$-Test bestimmt werden. Die Anfangswerte für die Energielagen wurden mit Hilfe eines Fadenkreuzes am Sichtgerät ermittelt. Als Anfangswerte für die natürlichen Breiten einiger bekannter LM-$M^3$-Linien konnten theoretische Daten /McG75b/ verwendet werden.

## 4. Übersicht über die Spektren

Ein typisches Augerspektrum der $L_2$- und $L_3$-Schale ist in Abb. 4.1 gezeigt. Es wurde durch 200 keV Protonen angeregt und hat optimale Auflösung mit einer instrumentellen Breite von 164 meV. Es sind darin die gemessenen und berechneten Übergangsenergien für die normalen Übergänge $L\text{-}M^2$ und für die Satellitenübergänge $LM\text{-}M^3$ und $LM^2\text{-}M^4$ eingezeichnet. Die berechneten Energien sind die Differenzen zwischen den totalen mittleren Energien $E_{av}$ der Konfigurationen des Anfangs- und Endzustandes wie in Abschnitt 1.2 definiert. Es sind also die Übergangsenergien, die dem adiabatischen Modell des Augerzerfalls entsprechen. Die berechneten Werte sind in Tabelle 4.1 zusammengestellt. Sie werden dort auch mit Rechnungen im "sudden model" verglichen, die etwa 10 eV höher liegen /La71a/ und meist auch viel höher liegen als die experimentellen Werte (s. Abb. 4 4.1). Die in dieser Arbeit nach dem adiabatischen Modell berechneten Werte stimmen fast exakt mit den von Larkins /La71a/ mit einem anderen Hartree-Fock-Programm /MOB68/ berechneten Werten überein.

In Abb. 4.1 sind außer den berechneten mittleren Übergangsenergien, die also die Schwerpunkte der Multipletts darstellen, auch die Multiplettaufspaltungen angedeutet. Die eingezeichneten Aufspaltungen wurden aus den berechneten Multiplettaufspaltungen der Anfangs- und Endzustände abgeleitet. Typische Multiplettaufspaltungen liegen in der Größenordnung von einigen eV. Die gerechneten Schwerpunktsenergien lassen sich unschwer mit den Schwerpunkten bestimmter Liniengruppen identifizieren. So kann man folgende Gruppen lokalisieren:

die Diagrammlinien $L_{2,3}\text{-}M_{23}^2$ um 205 eV,

die $L_{23}M_{23}\text{-}M_{23}^3$ und $L_{23}M_1\text{-}M_1M_{23}^2$ Satelliten bei 190 bis 200 eV,

die $L_{23}M_{23}\text{-}M_1M_{23}^2$ und $L_{23}M_1\text{-}M_1^2M_{23}$ Satelliten bei 175 bis 185 eV,

die $L_{23}M_{23}\text{-}M_1^2M_{23}$ Satelliten bei 160 bis 170 eV und

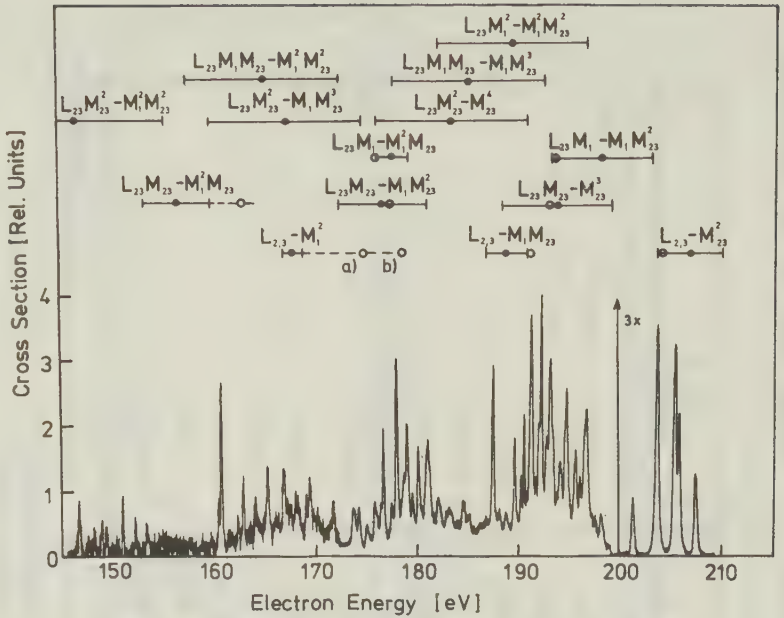



Abb. 4.1 Experimentell bestimmte (o) und berechnete (•) mittlere Energien für einige Augerübergänge. Auch die Aufspaltung der Anfangs- und Endzustände wurde berechnet. Die experimentellen Lagen der $L_{2,3}$-$M_1^2$-Linien entsprechen den Zuordnungen von McGuire /McG75b/ (a) und Mehlhorn et.al. /MS68/ (b).

Tab. 4.1 Berechnete mittlere Augerenergien. Die Rechnungen dieser Arbeit wurden mit dem Hartree-Fock-Programm von Froese-Fischer durchgeführt /FF72/, während Larkins /La71/ (s. a) u. b)) das von Mayers et.al. /MOB68/ entwickelte Hartree-Fock-Programm benutzte.

| Übergang | Energie [eV] | | |
|---|---|---|---|
| $L_{2,3}\text{-}M_1M_1$ | 167,46 | 167,6[a)] | 176,1[b)] |
| $L_{2,3}\text{-}M_1M_{23}$ | 188,73 | 188,8[a)] | 197,7[b)] |
| $L_{2,3}\text{-}M_{23}M_{23}$ | 206,67 | 206,8[a)] | 215,9[b)] |
| $L_{23}M_{23}\text{-}M_1^2M_{23}$ | 156,14 | | |
| $L_{23}M_{23}\text{-}M_1M_{23}^2$ | 176,89 | | |
| $L_{23}M_1\text{-}M_1^2M_{23}$ | 177,40 | | |
| $L_{23}M_{23}\text{-}M_{23}^3$ | 194,21 | | |
| $L_{23}M_1\text{-}M_1M_{23}^2$ | 198,15 | | |
| $L_{23}M_{23}^2\text{-}M_1^2M_{23}^2$ | 146,85 | | |
| $L_{23}M_{23}^2\text{-}M_1M_{23}^3$ | 166,93 | | |
| $L_{23}M_{23}^2\text{-}M_{23}^4$ | 183,48 | | |
| $L_{23}M_1M_{23}\text{-}M_1^2M_{23}^2$ | 165,02 | | |
| $L_{23}M_1M_{23}\text{-}M_1M_{23}^3$ | 185,10 | | |
| $L_{23}M_1^2\text{-}M_1^2M_{23}^2$ | 189,24 | | |

a) /La71/ "adiabatic model"
b) /La71/ "sudden model"

schließlich sogar

die $L_{23}M_{23}^2\text{-}M_1^2M_{23}^2$-Satelliten um 150 eV.

Eine genauere Klassifizierung einzelner Linien wird durch Berechnung relativer Energien unter Berücksichtigung der elektrostatischen Aufspaltung und der Spin-Bahn-Aufspaltung möglich. Dies wird in den folgenden Kapiteln im einzelnen durchgeführt. Die Abb. 4.1 zeigt aber auch schon

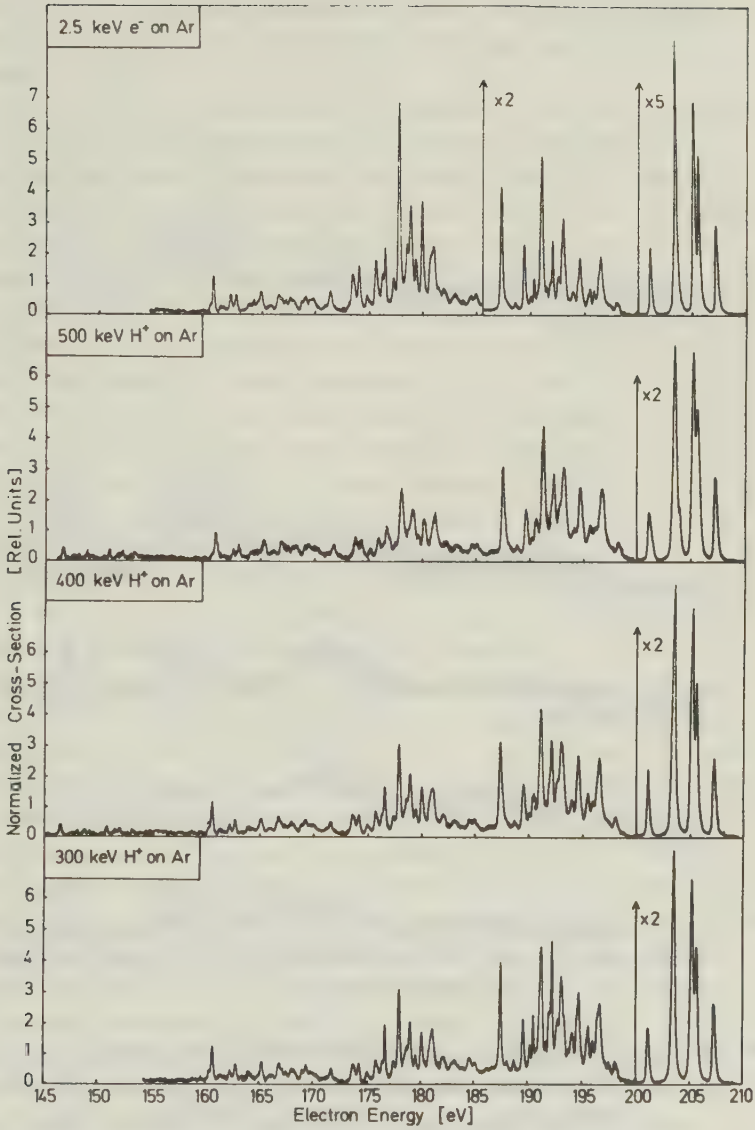



Abb. 4.2 a Gemessene $L_{2,3}$-Augerspektren von Argon. Die Wirkungsquerschnitte wurden auf gleiche Intensität der $L_{23}M_{23}(^3D_3)$-$M_1^2M_{23}(^2P)$-Satellitenlinie bei 160,64 eV normiert.

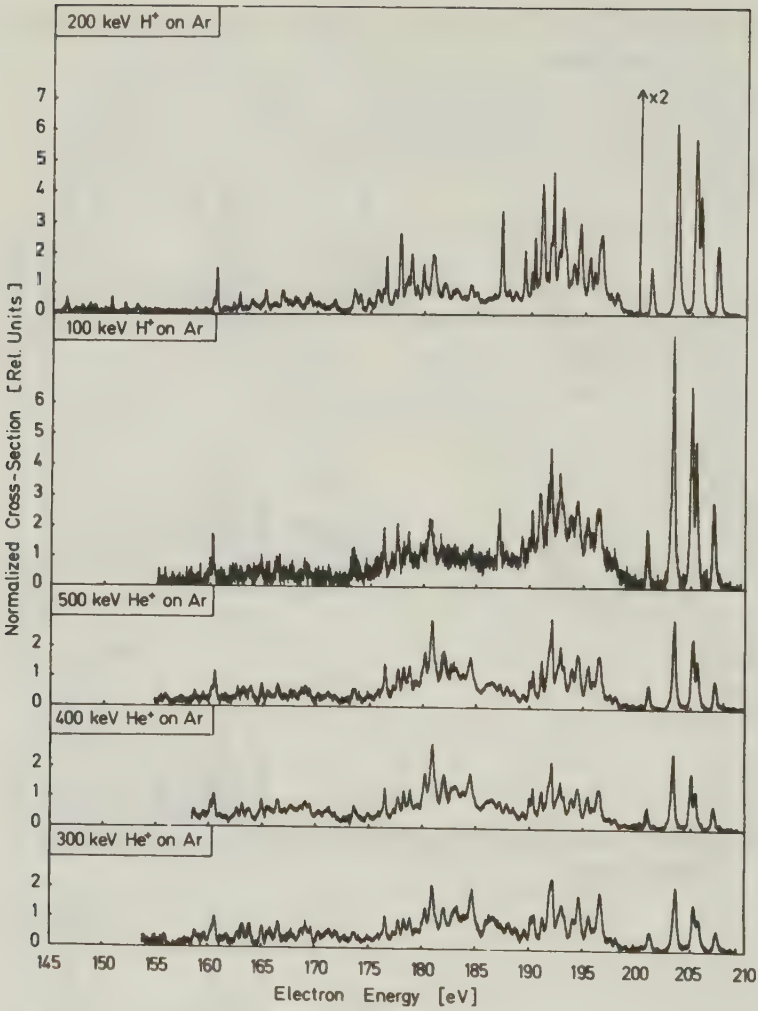



Abb. 4.2b Gemessene $L_{2,3}$-Augerspektren von Argon. Die Wirkungsquerschnitte wurden auf gleiche Intensität der $L_{23}M_{23}(^3D_3)$-$M_1^2M_{23}(^2P)$-Satellitenlinie bei 160,64 eV normiert.

deutlich die Schwierigkeit der Auswertung, denn zahlreiche Linien, die zu verschiedenen Gruppen gehören, überlagern sich.

In Abb. 4.1 sind für die Diagrammlinien und die LM-$M^3$-Satelliten auch experimentelle Energien eingetragen. Sie wurden durch Mittelung über die Multipletterme bestimmt. Für nicht beobachtete Terme wurden dabei entweder berechnete relative Energien benutzt, die experimentell gesichert sind, oder Daten aus der optischen Spektroskopie /Mo49/ herangezogen. Somit konnte wirklich über alle Terme gemittelt werden. Die Differenzen zwischen Experiment und Theorie liegen zwischen 0,5 eV und 11 eV, im Mittel bei etwa 4 eV. Für die $L_{2,3}$-$M_1^c$-Übergänge erhält man zwei verschiedene experimentelle Energien, je nachdem, ob man der älteren Klassifikation /MS68/ oder einer neuen Klassifikation folgt /McG75b/. Beim Vergleich der berechneten und gemessenen Werte zeigt sich deutlich, daß die berechneten Energien für die Diagrammlinien $L_{2,3}$-$M_1^2$ und $L_{2,3}$-$M_1M_{23}$ zu klein sind. Das bedeutet, daß die Energien der Endzustände, besonders für die Konfiguration $3s^0$, zu groß berechnet wurden. Auch für die Satellitenlinien $L_{23}M_{23}$-$M_1^2M_{23}$ liegt die berechnete Energie besonders niedrig. Generell erkennt man in Abb. 4.1, daß die berechneten Energien für die niederenergetischen Linien eines Ionisationsgrades viel zu klein, für die hochenergetischen Linien etwas zu groß ausfallen. Für die Energien der Endzustände bedeutet dies: Angenommen, die Energie des Anfangszustandes sei exakt berechnet, so liefert das Hartree-Fock-Programm zu kleine Energien für die Grundzustände (z.B. $3p^4$,$3p^3$) und zu große Werte für die hochangeregten Zustände desselben Ionisierungsgrades (z.B. $3s^0$, $3s3p^5$). Eine analoge Feststellung trifft auf die Anfangszustände zu.

In Abb. 4.2a und 4.2b sind alle gemessenen Spektren dargestellt. In diesen Abbildungen sind jedoch schon der kontinuierliche Anteil des Spektrums und eine quasikontinuierliche Verteilung unter den $L_{2,3}$-$M_{23}^2$ Linien

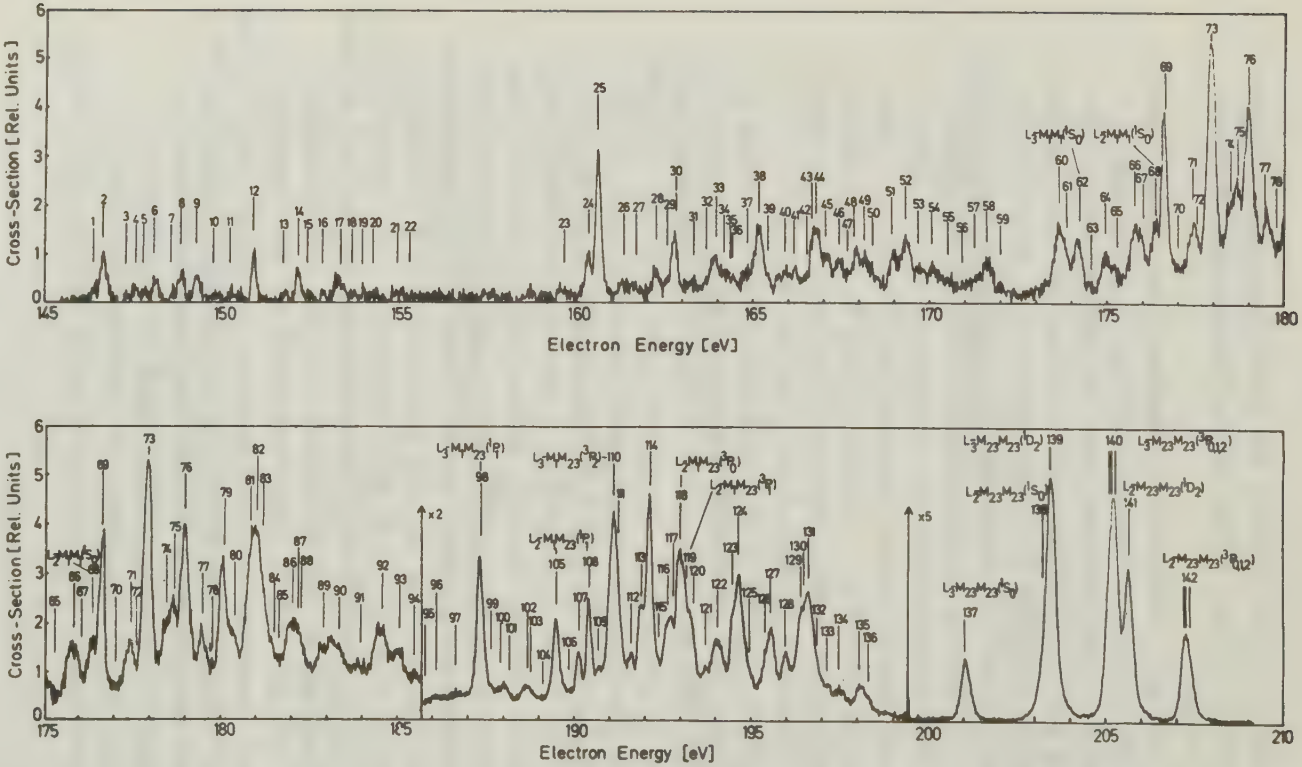



Abb. 4.3 Gemessenes Argon-$L_{2,3}$-Augerspektrum nach Anregung durch 200 keV Protonen mit der in dieser Arbeit verwendeten Liniennumerierung (s. Anhang).

subtrahiert worden wie in Kap. 3 beschrieben. Ferner wurden die Spektren auf gleiche Intensität der $L_{23}M_{23}(^3D_3)$-$M_1^2M_{23}(^2P)$-Linie normiert. Dies ist eine markante Linie bei 160,64 eV. Diese Normierung erwies sich als günstig für die weitere Auswertung, die in Kap. 5 geschildert wird.

Zur Übersicht wird noch in Abb. 4.3 das am besten aufgelöste Spektrum, angeregt durch 200 keV Protonen, mit der Numerierung aller beobachteten Linien wiedergegeben. Die dort eingetragenen Lagen der $L_{2,3}$-$M_1^2$-Linien entsprechen der Klassifikation McGuires /McG75b/.

## 5. Klassifizierung der Linien nach der Intensität

Die Grundlage für die Klassifizierung von Linien im $L_{2,3}$-Augerspektrum ist eine sehr hohe Auflösung, die hier bei 0,14% bis 0,08% liegt. Die Linien werden auf zweierlei Weise untersucht. Zum einen wird im Experiment die Abhängigkeit der Intensitäten von der Geschwindigkeit des Projektils im Bereich von 1,7 a.u. bis 13,6 a.u. gemessen. Andererseits werden berechnete Multiplettaufspaltungen und optische Daten /NANS76/, /Mo49/ zur genauen Analyse herangezogen.

Zur Untersuchung der Intensitätsvariation mußte eine geeignete Normierung gewählt werden. Es bieten sich zwei Möglichkeiten an, auf bekannte Linien zu normieren:

1. Normierung auf Diagrammlinien.
   Die Linien um 205 eV sind als die $L_{2,3}$-$M^2_{23}$-Übergänge bekannt.
2. Normierung auf die $L_{23}M_{23}(^3D_3)$-$M^2_1M_{23}(^2P)$-Satellitenlinie bei 160,64 eV.
   Diese Linie ist anhand ihrer kleinen Linienbreite, die nach der Theorie 9,4 meV betragen soll /McG75b/,/CC74/, und auf Grund ihrer hohen Intensität relativ zu den benachbarten Linien, die auch den theoretischen Daten entspricht /McG75b/, eindeutig identifizierbar.

Im ersten Fall liegt eine Normierung auf eine Linie vor, die mit guter Statistik gemessen werden kann. Bei dieser Normierung wäre folgendes Resultat zu erwarten: Diagrammlinien zeigen keine Intensitätsvariation mit der Projektilgeschwindigkeit, LM-$M^3$-Satelliten werden schwächer mit zunehmender Geschwindigkeit, weil die Wahrscheinlichkeit für Mehrfachionisation abnimmt /SSZ74/, und die Intensität von $LM^2$-$M^4$-Satelliten nimmt aus demselben Grund noch stärker ab.

Da die Mehrzahl der zu identifizierenden Linien gerade LM-$M^3$-Satelliten sind, wurde die zweite Methode der Normierung gewählt. Man erwartet dann für die LM-$M^3$-Satelliten konstante Intensitäten bei verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten, Intensitätszunahme mit wachsender Geschwindig-

keit für Diagrammlinien und Intensitätsabnahme für $LM^2$-$M^4$-Linien.

Nach dem Fit der gemessenen Spektren zeigte sich, daß drei Linientypen unterschieden werden können (s. Abb. 5.1):

Typ I: Die normierte Intensität nimmt mit der Projektilgeschwindigkeit zu. Das ist die Variation, die man von Diagrammlinien erwartet. Aber auch alle Satelliten, deren Anfangszustand einer Einfachionisation in der 2p-Schale entspricht, gehören zu diesem Typ, wie z.B. Übergänge der Art $L_2$-$M^3_{23}(4p)$.

Typ II: Die normierte Intensität dieser Linien zeigt keine Geschwindigkeitsabhängigkeit, wie man dies für LM-$M^3$-Satelliten erwartet. Wegen der schlechten Statistik der schwachen $LM^2$-$M^4$-Satelliten ist kein Unterschied zur Intensitätsvariation der LM-$M^3$-Satelliten erkennbar. Deshalb werden auch die $LM^2$-$M^4$-Satelliten als Typ II beobachtet.

Typ III: Diese Satelliten zeigen für $H^+$ und $e^-$-Anregung keine Geschwindigkeitsabhängigkeit ihrer Intensität, sind aber bei Anregung mit $He^+$ deutlich intensiver. Es kann sich dabei um Anfangszustände handeln, deren Anregung durch $H^+$ und $e^-$ auf Grund von Auswahlregeln verboten ist, aber für $He^+$-Projektile erlaubt ist, weil das zusätzliche Elektron des Projektils einen Spinaustausch machen kann. Ferner wäre es möglich, daß die unterschiedlichen Wirkungquerschnitte für Elektroneneinfang diese Intensitätsunterschiede für $H^+$- und $He^+$-Anregung bewirken. Diese Deutungen werden später diskutiert.

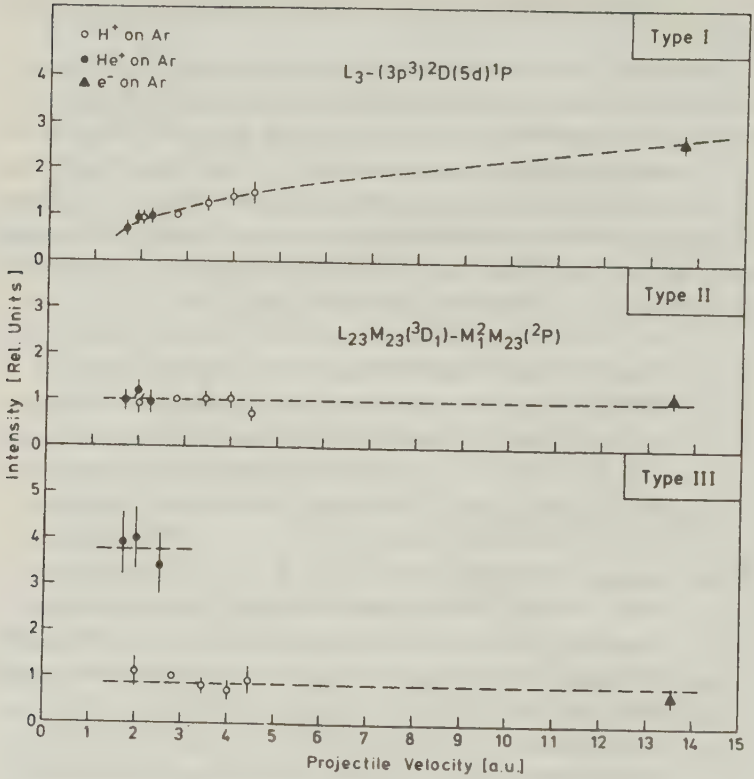



Abb 5.1 Verschiedene Typen von Augerlinien, klassifiziert nach der Intensität bei Anregung durch $H^+$, $He^+$ und $e^-$ bei verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten. Die Intensitäten wurden auf gleiche Intensität der $L_{23}M_{23}(^3D_3)$-$M_1^2M_{23}(^2P)$-Linie normiert. Zusätzlich wurden die Daten in dieser Darstellung für Anregung durch 200 keV $H^+$ auf 1 normiert.

## 6. Diagrammlinien

### 6.1 Energielagen

Die Lagen der intensiven Diagrammlinien $L_{2,3}$-$M_{23}^2$ und $L_{2,3}$-$M_1M_{23}$ sind gut bekannt /MS68/, /WBS73/. Für die sehr schwachen $L_{2,3}$-$M_1^2$-Linien wurden kürzlich neue Lagen vorgeschlagen /McG75b/. Entscheidend für diese Neuklassifikation war die damit erreichte bessere Übereinstimmung mit berechneten Intensitäten.

Es soll hier zunächst versucht werden, durch Berechnung der Übergangsenergien die Linien festzulegen. Dabei dienen die bekannten und gesicherten Linien als Test für die Genauigkeit der Rechnungen. In Tab. 6.1 findet sich ein Vergleich der absoluten Energien ( s. auch Abb. 4.1 und Tab. 4.1). Die experimentellen Daten wurden über die Multipletts der Anfangs- und Endzustände gemittelt. Dabei wurden die Termenergien mit den entsprechenden statistischen Faktoren (2J+1) bzw. (2S+1)(2L+1) gewichtet.

Da die Spin-Bahn-Aufspaltung der Endzustände mit der natürlichen Linienbreite vergleichbar war, wurden optische Daten /Mo49/ für die relativen Energien der Triplett-Niveaus beim Fit benutzt. Die Mittelung über diese Feinstrukturaufspaltung ergab wieder die Schwerpunktsenergie, die auch aus dem Spektrum abgelesen werden konnte. Bei einer Mittelung über die Spin-Bahn-Aufspaltung wird jeder LS-Term einzeln behandelt. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung zwischen den einzelnen Termen wird also als klein angenommen. Das ist für die Endzustände der Fall. Bei den Anfangszuständen $L_3$ und $L_2$ ist nur die Spin-Bahn-Aufspaltung vorhanden. Somit führt hier die Mittelung auf die exakte Schwerpunksenergie. Bei der Mittelung über die elektrostatische Aufspaltung der Endzustände wird jede Konfiguration isoliert behandelt. Das führt dazu, daß im Falle von Konfigurationswechselwirkung nicht die exakten Schwerpunktsenergien der einzelnen Konfigurationen berechnet werden.

| Final State | Calculated | Measured | Calculated | Measured |
|---|---|---|---|---|
| Averaged Multiplets | Absolute Energies | | | |
| $M_{23}^2$ | 206.67 | 204.10 | | |
| $M_1M_{23}$ | 188.73 | 190.84 | | |
| $M_1^2$ | 167.46 | 174.92[a] 178.65[b] | | |
| L-S-Coupling | Relative Energies | | Slater-Integral | |
| $M_{23}^2(^1S)$ | 4.069 | 3.23 | $F^2(3p3p)$ | |
| $(^1D)$ | 1.017 | 0.84 | 8.477 | 6.73 |
| $(^3P)$ | -1.017 | -0.83* | | |
| $M_1M_{23}(^1P)$ | 5.835 | 2.75 | $G^1(3s3p)$ | |
| $(^3P)$ | -1.945 | -0.92* | 11.670 | 5.51 |
| Intermediate Coupling | | | Spin-Orbit-Parameter | |
| $M_{23}^2(^1S_0)$ | 4.075 | 3.23 | | |
| $(^1D_2)$ | 1.021 | 0.84 | | |
| $(^3P_0)$ | -0.898 | -0.700+ | | |
| $(^3P_1)$ | -0.955 | -0.757+ | 0.125 | 0.127 |
| $(^3P_2)$ | -1.083 | -0.895+ | | |
| $M_1M_{23}(^1P_1)$ | 5.836 | 2.76 | | |
| $(^3P_0)$ | -1.820 | -0.794+ | | |
| $(^3P_1)$ | -1.883 | -0.860+ | 0.125 | 0.126 |
| $(^3P_2)$ | -2.008 | -0.983+ | | |

* Averaged over fine-structure components
\+ Relative splitting from optical data[c]
a)/McG75/, b)/WBS73/, c)/Mo49/.

Tab. 6.1 Berechnete und gemessene Energien der Diagrammlinien. Durch den Vergleich der absoluten Energien wird die Güte der Hartree-Fock-Methode für die betreffenden Konfigurationen demonstriert, während der Vergleich der Multiplettaufspaltungen Rückschlüsse erlaubt auf die Slaterintegrale, die die elektrostatische Aufspaltung beschreiben, und auf den Spin-Bahn-Parameter, der dem Opereator der Spin-Bahn-Wechselwirkung proportional ist. Alle Energien sind in eV angegeben. Relative Energien beziehen sich auf die Schwerpunktsenergie $E_{av}$ des betreffenden Multipletts.

In den Rechnungen zeigt sich, daß die mittleren Energien für die $L_{2,3}$-$M_{23}^2$- und $L_{2,3}$-$M_1M_{23}$-Übergänge um 2,5 eV größer bzw. um 2,0 eV kleiner als die gemessenen Werte sind. Bei den $L_{2,3}$-$M_1^2$-Übergängen ist die Abweichung etwa viermal so groß. Folgt man McGuires Identifikation /McG75b/, so beträgt die Differenz etwa 7,5 eV. Nach der älteren Klassifikation /MS68/ beträgt sie sogar 11 eV. Eine genaue Untersuchung zur Identifikation der $L_{2,3}$-$M_1^2$-Linien folgt am Ende des Kapitels.

Die einfachste Möglichkeit, die Energie des $M_1^2$-Terms etwas genauer zu berechnen, ist die Berücksichtigung der Konfigurationswechselwirkung mit der Konfiguration $M_{23}^2$. Berechnet man die Konfigurationswechselwirkung der $M_1^2(^1S_0)$-, $M_{23}^2(^1S_0)$- und $M_{23}^2(^3P_0)$-Terme miteinander, so wird die Diskrepanz zum Experiment aber noch größer. Eine Rechnung, die sowohl die elektrostatische Wechselwirkung, wie auch die Spin-Bahn-Wechselwirkung zwischen den drei Termen berücksichtigt, erfordert die Diagonalisierung der folgenden Matrix /Me68/:

$$\begin{pmatrix} E_{av}(3s^0) & -1/\sqrt{3}\cdot G^1(3s3p) & 0 \\ -1/\sqrt{3}\cdot G^1(3s3p) & E_{av}(3p^4)+12/25\cdot F^2(3p3p) & \sqrt{2}^{-1}\zeta_{3p} \\ 0 & \sqrt{2}^{-1}\zeta_{3p} & E_{av}(3p^4)-3/25\cdot F^2(3p3p)+\zeta_{3p} \end{pmatrix}$$

Benutzt man die Werte aus einer Hartree-Fock-Rechnung für die $F^k$- und $G^k$-Integrale, den Spin-Bahn-Parameter $\zeta_{3p}$ und die mittleren Energien $E_{av}$, so ergibt sich schließlich für den $L_{2,3}$-$M_1^2$-Übergang eine Energie von 166,22 eV.

Dieser Wert ist nochmals um 1,2 eV niedriger als der bisherige berechnete Wert. Dies läßt vermuten, daß man Konfigurationswechselwirkung mit energetisch höher liegenden Konfigurationen berücksichtigen muß. In der Nähe des $M_1^2(^1S_0)$-Terms gibt es zahlreiche Zustände von $Ar^{2+}$, die mit diesem in Konfigurationswechselwirkung treten können. Für eine genauere Rechnung wurden von Luken /Lu77/

außer den beiden berücksichtigten folgende Konfigurationen vorgeschlagen: $3s3p^4(^2D)3d(^1S)$, $3s^23p^3(^2P)4p(^1S)$, $3s^23p^2(^3P)3d^2(^1S)$, $3s^23p^2(^1D)3d^2(^1S)$, $3s^23p^2(^1S)3d^2(^1S)$, $3s^03p^4(^3P)3d^2(^1S)$, $3s^03p^4(^1D)3d^2(^1S)$ und $3s^03p^4(^1S)3d^2(^1S)$.

Vor kurzem wurde eine Rechnung von Froese-Fischer durchgeführt, die noch zusätzlich zu den oben berücksichtigten beiden Konfigurationen die Konfigurationen $3s3p^43d$ und $3s^23p^34p$ einschließt/FF77/. Das führte zu einer Absenkung der Energie des Endzustandes um 8,590 eV gegenüber der Rechnung dieser Arbeit. Damit ergibt sich für die Übergänge $L_{2,3}$-$M_1^2$ eine mittlere Energie von 176,05 eV. Die genaue Untersuchung im nächsten Abschnitt legt nahe, die Linien 60 und 66 als $L_{2,3}$-$M_1^2$-Übergänge zu betrachten, die bei einer mittleren Energie von 174,35 eV liegen. Es bleibt allerdings noch zu untersuchen, wie sehr sich der berechnete Wert durch Beimischung der übrigen oben vorgeschlagenen Konfigurationen noch verschieben kann. Erfahrungsgemäß sollte aber der größte Anteil der Konfigurationswechselwirkung durch die Konfiguration $3s3p^43d$ schon berücksichtigt sein /Lu77/.

In Tab. 6.1 sind auch die relativen Energien für die Diagrammlinien in LS-Kopplung bezüglich der Schwerpunktsenergie des jeweiligen Multipletts $E_{av}$ angegeben. Der Vergleich der experimentellen Daten mit den gerechneten Werten zeigt relativ gute Übereinstimmung im Fall der $L_{2,3}$-$M_{23}^2$-Linien. Das ist gleichbedeutend damit, daß das Slaterintegral $F^2(3p3p)$ "nur" um 26% zu groß berechnet wurde. Der experimentelle Wert wurde aus den Termabständen ermittelt. Daß die Rechnung für den Endzustand $M_{23}^2$ so gute Ergebnisse zeigt, verglichen mit allen anderen $Ar^{2+}$-Konfigurationen, ist darauf zurückzuführen, daß es sich hierbei um den Grundzustand handelt. Für diesen besitzt die Energie beim Hartree-Fock-Verfahren ein echtes Minimum, während sie für angeregte Zustände gleicher Symmetrie nur stationär wird.

Für das $M_1M_{23}$-Multiplett ergab dagegen die Rechnung ein um einen Faktor 2 zu großes Slaterintegral. Diese große Abweichung kann auch ein Hinweis auf starke Konfigurationswechselwirkung sein /McG75b/.

Der Vergleich der relativen Energien in intermediärer Kopplung mit dem Experiment ist ein Test für den Spin-Bahn-Parameter $\zeta_{3p}$. Da die Feinstrukturaufspaltung im Augerspektrum bei der bis jetzt erreichten Auflösung noch nicht gemessen werden kann, wohl aber im Linienprofil sichtbar wird /RDS76/, wurden für die relativen Energien der Feinstrukturkomponenten Daten aus optischen Messungen zu Grunde gelegt /Mo49/. Die Übereinstimmung der gemessenen und berechneten Spin-Bahn-Parameter $\zeta_{3p}$ ist sehr gut. Der experimentelle Wert wurde aus der Differenz

$$E(L_{2,3}\text{-}M_{23}^2(^3P_1)) - \bar{E}(L_{2,3}\text{-}M_{23}^2(^3P)) = \zeta_{3p}$$

/CS70/ berechnet. Hierbei ist $\bar{E}(L_{2,3}\text{-}M_{23}^2(^3P))$ die über die Feinstruktur des $^3P$-Zustands gemittelte Energie. Für die $M_1M_{23}$-Konfiguration ergab sich $\zeta_{3p}$ aus der Differenz

$$E(L_{2,3}\text{-}M_1M_{23}(^3P_0)) - E(L_{2,3}\text{-}M_1M_{23}(^3P_2)) = 3/2\ \zeta_{3p}$$

/CS70/. Die Übereinstimmung mit dem Experiment ist auch hier sehr gut.

Der Abstand der Anfangszustände $L_2$ und $L_3$ wurde zu (2,13±0,04) eV bestimmt. Dies ist ein Mittelwert aus den Messungen verschiedener zum Typ I gehöriger Doubletts. Nach Tabelle 6.2 stimmt er gut mit früheren Messungen überein. Der berechnete Wert von 2,105 eV liegt innerhalb der experimentellen Fehlergrenzen.

Tab. 6.2 Die Energiedifferenz zwischen dem $L_2$- und $L_3$-Niveau von Argon, experimentelle Werte.

| $\Delta E$ [eV] | Author |
|---|---|
| 2.13 ±0.04 | This Work |
| 2.14 ±0.02 | Mehlhorn and Stahlherm[a)] |
| 2.17 ±0.07 | Volz and Rudd[b)] |
| 2.163±0.011 | Krause[c)] |
| 2.18 | Deslattes[d)] |
| 2.03 ±0.01 | Nakamura et.al.[e)] |

a)/MS68/, b)/VR70/, c)Ref. in /VR70/,
d)/De69/, e)/Na68/,

## 6.2 Intensitäten und Linienbreite

Während die Energielagen der Linien Auskunft geben über die diskreten Energieniveaus im Atom, und damit über die Wellenfunktionen der gebundenen Elektronen, liefert ein Vergleich gemessener und berechneter Intensitäten und Linienbreiten zusätzliche Information über das emittierte Elektron. Die Matrixelemente für die Übergangswahrscheinlichkeiten enthalten nämlich die Wellenfunktion des emittierten Augerelektrons. Es ist eine komplizierte Aufgabe, diese Wellenfunktion zu berechnen, weil man erst weit außerhalb des Atoms eine freie Welle ansetzen kann. Im Innern des Atoms muß man die Hartree-Fock-Gleichungen für das Atom mit einem Elektron mit positiver Energie lösen. Dieses Verfahren würde einen sehr großen Rechenaufwand bedeuten. Deshalb werden im allgemeinen Näherungen für den Austauschterm, der durch die Antisymmetrisierung der Wellenfunktion entsteht, benutzt. Es zeigt sich dann, daß die berechneten Werte oft stark von der Güte dieser Näherung abhängen (s. z.B. /RDS76/).

Die relativen Intensitäten in Tab. 6.3 zeigen diesen Trend deutlich. Die experimentellen Werte sind Mittelwerte aus den Messungen mit Anregung durch 200-keV- bis 500-keV-Protonen und 2,5-keV-Elektronen. Ferner sind experimentelle Daten von Werme und Mitarbeitern /WBS73/ und theoretische Daten von McGuire /McG71/ und Rubenstein /Ru55/ angegeben. Die Intensitäten wurden so normiert, daß jeweils die Summe über alle $L_3$-Zerfälle 100 ergibt. Bei den theoretischen Daten wurde angenommen, daß der $L_2$-Anfangszustand halb so stark bevölkert wird wie der $L_3$-Anfangszustand. Diese statistische Bevölkerung wird durch das Experiment gut bestätigt. Die gemessenen Intensitäten für die $L_{2,3}$-$M_1^2$-Übergänge entsprechen der Klassifikation McGuires /McG75b/. Durch die im Abschnitt 6.4 diskutierte Neuklassifizierung der $L_{2,3}$-$M_1^2$-Übergänge werden die Intensitäten etwa 10% größer. Innerhalb der Fehlergrenzen zeigt sich Übereinstimmung sowohl mit den experimentellen Daten von

Tab. 6.3 Relative Intensitäten der Diagrammlinien. Die Intensitäten wurden so normiert, daß die Gesamtintensität der $L_3$-Zerfälle stets 100 beträgt. Für die theoretischen Intensitäten der $L_2$-Zerfälle wurde statistische Besetzung der Anfangszustände vorausgesetzt, woraus sich eine Gesamtintensität von 50 ergibt.

| Transition | Experiment | | Theory | |
|---|---|---|---|---|
| | This Work | Werme et.al.[a] | McGuire[b] | Rubenstein[c] |
| $L_2$-$M_1^2(^1S)$ | 1.2 ± 0.3 | 0.8 | 0.6 | 0.7 |
| $-M_1M_{23}(^3P)$ | 4.7 ± 0.3 | 4.3 | 4.9 | 6.1 |
| $(^1P)$ | 4.2 ± 0.6 | 3.6 | 5.5 | 6.8 |
| $-M_{23}^2(^3P)$ | 14.8 ± 1.8 | 15.8 | 16.0 | 17.9 |
| $(^1D)$ | 20.3 ± 2.6 | 20.8 | 18.8 | 15.1 |
| $(^1S)$ | 6.1 ± 2.0 | 6.2 | 4.3 | 3.4 |
| $\sum$ | 51.4 ± 3.8 | 51.5 | 50.0 | 50.0 |
| $L_3$-$M_1^2(^1S)$ | 1.7 ± 0.3 | 1.4 | 1.2 | 1.4 |
| $-M_1M_{23}(^3P)$ | 8.0 ± 0.6 | 10.9 | 9.6 | 12.2 |
| $(^1P)$ | 7.3 ± 0.6 | 6.7 | 11.1 | 13.7 |
| $-M_{23}^2(^3P)$ | 37.0 ± 2.0 | 34.3 | 31.8 | 35.9 |
| $(^1D)$ | 36.7 ± 2.0 | 34.0 | 37.6 | 30.1 |
| $(^1S)$ | 9.3 ± 0.9 | 12.7 | 8.7 | 6.8 |
| $\sum$ | 100.0 | 100.0 | 100.0 | 100.0 |

a)/WBS73/, b)/McG75b/, c)/Ru55/.

Werme et.al. /WBS73/, als auch mit den theoretischen Daten McGuires /McG75b/. Die Übereinstimmung mit Rubensteins Rechnungen ist weniger gut. Rubenstein benutzte Hartree-Wellenfunktionen und vernachlässigte damit alle Austauschintegrale, die als Folge der Antisymmetrisierung der Wellenfunktionen beim Hartree-Fock-Ansatz auftreten. McGuire benutzte das Potential von Herman und Skillman /HS63/, das durch Hartree-Fock-Slater-Rechnungen bestimmt wurde. Darin werden die Austauschintegrale nicht vernachlässigt, sondern durch ein gemitteltes Austauschpotential angenähert.

Noch deutlicher kann man die Güte der Rechnungen anhand der natürlichen Linienbreiten verfolgen. Tab. 6.4 zeigt, daß der hier durch Fit bestimmte Wert für die $L_{2,3}$-Niveaubreite

Tab. 6.4 Breite des $L_2$- bzw. $L_3$-Niveaus von Argon

| $\Gamma_{L_{2,3}}$ [meV] | Authors |
|---|---|
| Experiment | |
| 100 ± 20 | This Work |
| 100 ± 20 | Ridder, Dieringer and Stolterfoht[a)] |
| 100 ± 20 | Kondow et.al.[b)] |
| 160 ± 20 | Mehlhorn and Stahlherm[c)] |
| 280 ± 30 | Volz and Rudd[d)] |
| 250 ± 100 | Deslattes[e)] |
| 210 | Krause[f)] |
| Theory | |
| 132 | Walters and Bhalla[g)] |
| 159 | Chen and Crasemann[h)] |
| 167 | McGuire[i)] |
| 98.8 | Rubenstein[j)] |

a)/RDS76/, b)/Ko73/, c)/MS68/, d)/VR70/, e)/De64/, f)/Kr74/, g)/WB71/, h)/CC74/, i)/McG71/, j)/Ru55/.

gut mit den neueren Messungen verschiedener Autoren übereinstimmt. Hierbei wurde angenommen, daß die Endzustände des Zerfalls des 2p-Lochs langlebig sind und somit die Linienbreite gleich der Niveaubreite gesetzt werden kann /MSV68/. Innerhalb der Fehlergrenzen wurde Übereinstimmung der Breiten des $L_2$- und $L_3$-Niveaus gefunden, wie man es im Argon erwartet /MS68/. Die natürlichen Linienbreiten wurden durch Fit der Linien mit einer theoretischen Kurve bestimmt , die durch Faltung von Lorentzkurven mit der optimal 164 meV breiten Spektrometerfunktion entsteht (s. Abschnitt 3.2).

Die gute Übereinstimmung mit dem theoretischen Wert Rubensteins ist wahrscheinlich zufällig, da er wie oben beschrieben vom einfachsten Atommodell ausging. Bei den anderen theoretischen Werten ist die Übereinstimmung um so besser, je besser die Näherung für die Austauschterme ist. Chen und Crasemann /CC74/ benutzten die $X_\alpha$-Näherung, in der im wesentlichen das Hartree-Fock-Slater Austauschpotential mit einem variablen Parameter $\alpha$ multipliziert wird. Die kompliziertesteste Austausch-Näherung von Herman und Mitarbeitern /HD069/ führte in der Rechnung von Walters und Bhalla /WB71/ zur besten Übereinstimmung mit dem Experiment. Dieser Vergleich zeigt, daß besonders natürliche Linienbreiten empfindlich sind auf die Güte der Rechnung. Relative Linienintensitäten hängen weniger kritisch vom benutzten Atommodell ab.

## 6.3 Test auf Winkelabhängigkeiten

Die vorliegenden Messungen wurden unter eiem festen Winkel von 150° relativ zum Projektilstrahl vorgenommen. Man muß aber im allgemeinen annehmen, daß die Augerelektronen nicht isotrop emittiert werden, falls der Gesamtdrehimpuls der primären Leerstelle J>1/2 ist /CM74a,b/. Die Messungen von Cleff und Mehlhorn zeigen, daß bei Anregung durch 2,5-keV-Elektronen eine Intensitätsvariation von ca 4% für die $L_3$-$M_{23}^2$($^1S_0$)-Linie zwischen 30° und 90° zu erwarten ist . Für kleinere Geschwindigkeiten nimmt die Winkelabhängigkeit der Intensität zu. Nimmt man an, daß diese Größenordnung typisch für die Winkelabhängigkeit von Augerlinien ist, so kann man hier bei Anregung durch 2,5-keV-Elektronen die Winkelabhängigkeiten vernachlässigen, da die beobachteten Intensitätsvariationen als Funktion der Projektilgeschwindigkeit wesentlich größer sind. Für Anregung durch $H^+$ und $He^+$ kann man jedoch nicht voraussagen, wie groß die Winkelabhängigkeiten sein werden.

Für die Anregung mit 300-keV-Protonen wurde eine Testmessung durchgeführt. In Tab. 6.5 sind die relativen $L_3$-$M_{23}^2$-Intensitäten für 30°, 90° und 150° angegeben. Normiert wurde auf die $L_2$-$M_{23}^2$($^3P$)-Linie, die nach der Theorie winkelunabhängig ist, da im Anfangszustand J=1/2 ist. Innerhalb der experimentellen Fehler von 5%

Tab 6.5 Intensitäten der Diagrammlinien $L_3$-$M_{23}^2$ bei Beobachtung unter verschiedenen Winkeln.

| θ | Intensity [Rel. Units] | | |
|---|---|---|---|
| | $L_3$-$M_{23}^2$($^1S$) | $L_3$-$M_{23}^2$($^1D$) | $L_3$-$M_{23}^2$($^3P$) |
| 30° | 0.60 | 2.5 | 2.5 |
| 90° | 0.66 | 2.6 | 2.4 |
| 150° | 0.62 | 2.5 | 2.4 |

ist keine Winkelabhängigkeit zu beobachten. Es wurden auch Spektren mit Satellitenlinien unter verschiedenen Winkeln aufgenommen. Auch dabei wurde keine Winkelabhängigkeit beobachtet. Damit ist die Annahme gerechtfertigt, daß die unter einem festen Winkel gemessene Intensität proportional zu der in den gesamten Raumwinkel emittierten Intensität ist.

## 6.4 Identifikation der $L_{2,3}$-$M_1^2$-Linien

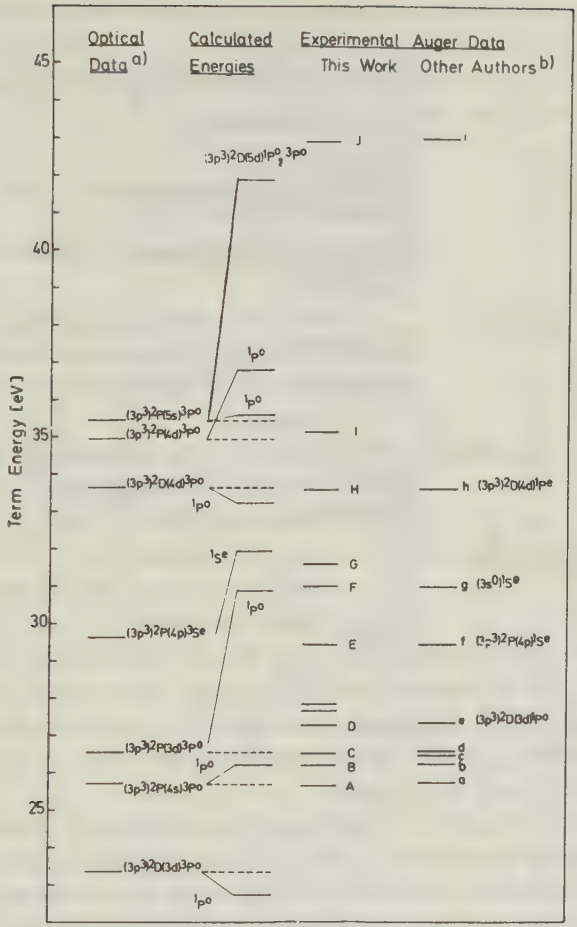
In diesem Kapitel wird nach der Lage der $L_{2,3}$-$M_1^2$-Linien gesucht. Die Hartree-Fock-Rechnung in Kapitel 4 hatte gezeigt, daß diese Linien bei 167 eV liegen sollten, etwa 40 eV unterhalb der $L_{2,3}$-$M_{23}^2$-Übergänge. Die bisherigen Klassifikationen /MS68/, /McG75b/ lokalisieren die $L_{2,3}$-$M_1^2$-Linien etwa 30 eV unterhalb der $L_{2,3}$-$M_{23}^2$-Übergänge. Da die $L_{2,3}$-$M_1M_{23}$- und $L_{2,3}$-$M_{23}^2$-Übergänge einwandfrei im Spektrum lokalisiert sind und die hier berechneten Übergangsenergien auf ~2 eV mit den gemessenen Werten übereinstimmen, ist anzunehmen, daß die berechnete Energie des Endzustandes $M_1^2$ nicht stimmt.

Die Energien der Endzustände im $Ar^{2+}$ werden im Folgenden als Termenergien bezüglich des $Ar^{2+}$-Grundzustandes $M_{23}^2(^3P_2)$ angegeben. Im vorliegenden Fall bedeutet dies, daß nach den Rechnungen der $M_1^2$-Term bei 40 eV liegt, experimentell aber bisher bei etwa 30 eV angenommen wird. Um die genaue Lage des $M_1^2$-Terms zu finden, muß einerseits das Spektrum abgesucht werden nach Linien, die wie alle Diagrammlinien als Doublett im Abstand von 2,13 eV auftreten, vom Typ I sind und im Intensitätsverhältnis

$$2 : 1 = I(L_3\text{-}...) : I(L_2\text{-}...)$$

stehen. Dann muß versucht werden, anhand existierender Termenergien für $Ar^{2+}$-Konfigurationen /Mo49/ und mit Hilfe von Rechnungen möglichst viele dieser Linien zuzuordnen, so daß evtl. nur noch der Term $M_1^2$ übrigbleibt.

Die Suche im Spektrum nach Diagrammlinien oder Satelliten mit den gleichen Anfangszuständen, aber komplizierteren Endzuständen, ergab 12 Paare (s.Abb. 6.1, 6.2), von denen die 10 intensivsten als Terme A-J bezeichnet wurden. In Tab. 6.6 sind diese Linien aufgeführt. Da die Linien teilweise sehr schwach sind oder von anderen Linien überlagert werden, ist bei den schwächeren Linien der Doubletts, die zum Anfangszustand $L_2$ gehören, oft die Forderung nach Zugehörigkeit zum Typ I nicht erfüllt. Die Nummern dieser Linien sind dann eingeklammert. Auch der Doublett-Abstand ist infolge Überlagerung von Linien,




a)/Mo49/, b)/McG75b/,/WBS73/.

Abb. 6.1 Termenergien für Konfigurationen $3p^3nl$ in der Nähe des Terms $3s^0(^1S^e)$. Relativ zu den optischen Daten wurden diejenigen Terme berechnet, die durch Konfigurationswechselwirkung mit den benachbarten Termen $3s^0(^1S^e)$, $3s3p^5(^1P^o)$ und $(^3P^o)$ bevölkert werden. Durch eine Verbindungslinie ist angedeutet, bezüglich welcher Terme die Rechnungen normiert wurden. Die $^1S^e$-, $^1P^o$- und $^3P^o$-Terme aus den optischen Messungen wurden gestrichelt gezeichnet.

die sich im Fit durch zu große Linienbreite zeigt, teilweise mit größeren Fehlern behaftet.

Die Termenergien wurden aus den gemessenen Übergangsenergien wie folgt berechnet:

$$E_{Term}(\ldots) = -E_{Exp.}(L_3\text{-}\ldots) + E_{Exp.}(L_3\text{-}M_1M_{23}(^3P_2)) + E_{Term}(M_1M_{23}(^3P_2)) \ .$$

Dabei ist

$E_{Exp.}(L_3\text{-}\ldots)$ die aus dem Experiment bestimmte Übergangsenergie zu dem interessierenden Endzustand,

$E_{Exp.}(L_3\text{-}M_1M_{23}(^3P_2))$ die aus dem Experiment bestimmte Übergangsenergie der Diagrammlinie $L_3\text{-}M_1M_{23}(^3P_2)$,

$E_{Term}(M_1M_{23}(^3P_2))$ die Termenergie für $M_1M_{23}(^3P_2)$ aus den Moore-Tabellen /Mo49/.

Die Termenergien wurden also stets aus den Linien von den Zerfällen des $L_3$-Anfangszustandes abgeleitet, weil diese Linien doppelt so intensiv sind wie die Linien vom Anfangszustand $L_2$. Jeder Termenergie entspricht im Spektrum (s. Abb. 6.2) ein Linienpaar.

In Tab. 6.6 sind die relativen Intensitäten der Linien aus dem durch 2,5 keV $e^-$ angeregten Spektrum eingetragen. Diese Intensitäten wurden gewählt, weil durch schnelle Elektronen die einfach ionisierten Anfangszustände $L_2$ und $L_3$ stärker angeregt werden als mehrfach ionisierte Anfangszustände. Infolgedessen sind die hier zu untersuchenden Linien weniger durch $LM\text{-}M^3$- und $LM^2\text{-}M^4$-Linien überlagert, als in den durch $H^+$ und $He^+$ angeregten Spektren. Es gibt in Tab. 6.6 Linien, die in mehreren Doubletts auftreten. In diesen Fällen wurden die Intensitäten so aufgeteilt, daß die Linien eines jeden Doubletts wieder ungefähr im Intensitätsverhältnis 2:1 stehen ( s. eingeklammerte Intensitäten). Da beide Linien des Doubletts E

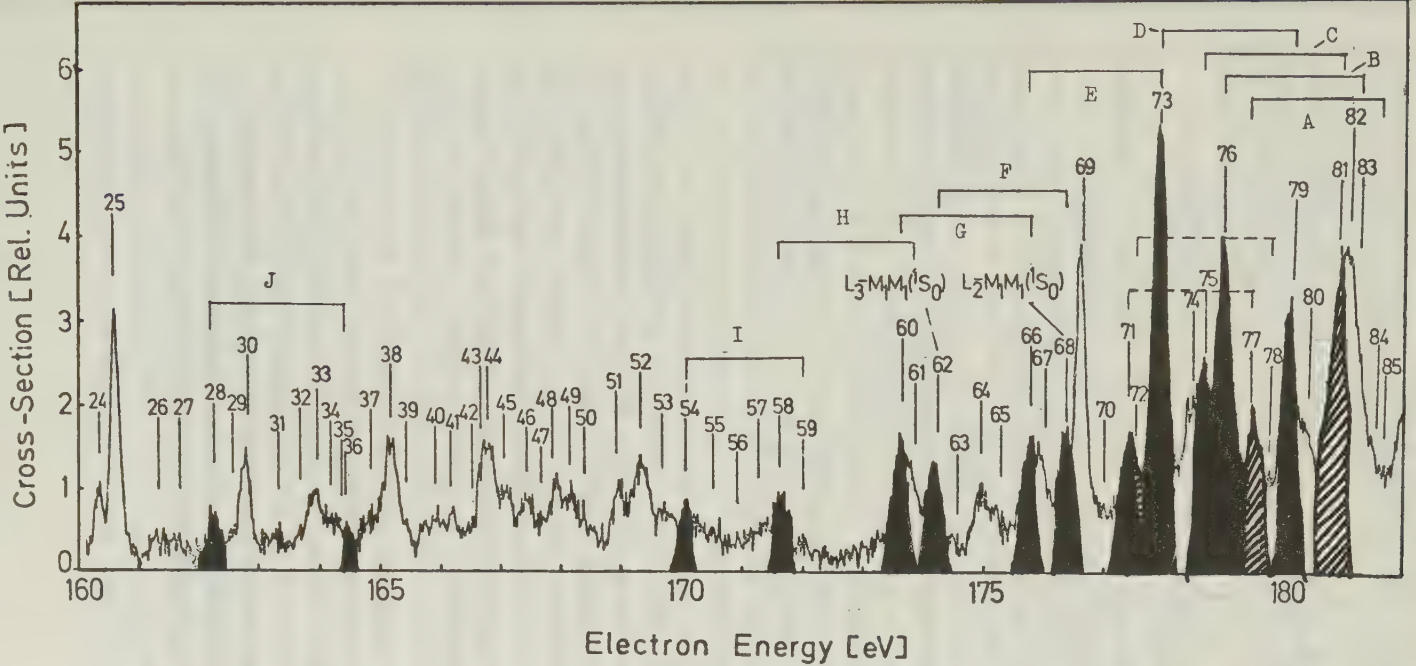



Abb. 6.2 Das Argon-Auger-Spektrum nach Anregung durch 200 keV $H^+$ in der Nähe der $L_{2,3}$-$M_1^2$-Übergänge. Alle Linien des Typs I sind schwarz gezeichnet. Falls die Zuordnung zum Typ I nicht ganz sicher ist, wurden die Linien schraffiert. Alle übrigen Linien gehören nicht zum Typ I. Die eingezeichneten Lagen der $L_{2,3}$-$M_1^2$-Übergänge entsprechen der Klassifikation McGuires /McG75b/. In dieser Arbeit werden die Linien 60 und 66 als $L_{2,3}$-$M_1^2$-Übergänge identifiziert. Die in Tab. 6.6 aufgeführten Doubletts mit dem $L_2$-$L_3$-Abstand von 2,13 eV wurden eingezeichnet.

| Line-Numbers | $L_2$-$L_3$-Spacing [eV] | Intensity [Rel.Units] | | Term Energy [eV] A | B | C | Assignment Moore[a] | McGuire[b] | This Work |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | - | - | 22.74 | ... | ... | $(3p^3)^2D(3d)^1P^o$ |
| | | | | - | 23.37 | - | $(3p^3)^2D(3d)^3P^o$ | ... | ... |
| 77 (85) | 2.07±0.1 | 200 (150) | 75 | 25.68 | 25.70 | - | $(3p^3)^2P(4s)^3P^o$ | a $(3p^3)^2P(4s)^3P^o$ | A $(3p^3)^2P(4s)^3P^o$ |
| 76 (83) | 2.17±0.05 | 426 | 245 | 26.20 | - | 26.23 | ... | b $(3p^3)^2P(4s)^1P^o$ | B $(3p^3)^2P(4s)^1P^o$ |
| 75 (82) | 2.30±0.01 | 153 | 74 | 26.45 | 26.54 | - | ... | c $(3p^3)^2P(3d)^3P^o$ | ... |
| 75 81 | 2.12±0.01 | 153 | 151 | 26.53 | 26.54 | - | $(3p^3)^2P(3d)^3P^o$ | d $(3p^3)^2P(3d)^3P^o$ | C $(3p^3)^2P(3d)^3P^o$ |
| | | | | | | | ... | or $(3p^3)^2P(3d)^1P^o$ | ... |
| 73 79 | 2.14±0.01 | 718 (600) | 302 | 27.27 | - | - | ... | e $(3p^3)^2D(3d)^1P^o$ | D ? |
| 72 (78) | 2.17±0.05 | 19 | - | 27.65 | - | - | ... | ... | ? |
| 71 77 | 2.13±0.01 | 96 | 200 (50) | 27.81 | - | | ... | ... | ? |
| 66 73 | 2.18±0.03 | 187 (110) | 718 (300) | 29.47 | - | - | ... | f $(3p^3)^2P(4p)^1S^e$ | E ? |
| | | | | - | 29.65 | - | $(3p^3)^2P(4p)^3S^e$ | ... | ... |
| 62 68 | 2.15±0.02 | 154 | 102 | 30.99 | - | 30.92 | ... | g $(3s^0)^1S^e$ | F $(3p^3)^2P(3d)^1P^o$ |
| 60 66 | 2.11±0.01 | 160 | 187 (30) | 31.56 | - | | ... | ... | G $(3s^0)^1S^e$ |
| | | | | | | 31.99 | | | or $(3p^3)^2P(4p)^1S^e$ |
| | | | | - | - | 33.26 | ... | ... | $(3p^3)^2D(4d)^1P^o$ |
| 58 (61) | 2.25±0.2 | 110 | 56 | 33.61 | 33.66 | - | $(3p^3)^2D(4d)^3P^o$ | h $(3p^3)^2D(4d)^1P^o$ | H $(3p^3)^2D(4d)^3P^o$ |
| | | | | - | 34.90 | - | $(3p^3)^2P(4d)^3P^o$ | ... | ... |
| | | | | - | 35.44 | - | $(3p^3)^2P(5s)^3P^o$ | ... | ... |
| 54 (59) | 1.94±0.2 | 70 | 21 | 35.15 | - | 35.60 | ... | ... | I $(3p^3)^2P(5s)^1P^o$ |
| | | | | - | - | 36.80 | ... | ... | $(3p^3)^2P(4d)^1P^o$ |
| 28 30 | 2.13±0.1 | 69 | 47 | 42.92 | - | 41.74 | ... | i $(3p^3)^2D(5d)^1P^o$ | J $(3p^3)^2D(5d)^1P^o$ |
| | | | | - | - | 41.89 | ... | ... | or $(3p^3)^2D(5d)^3P^o$ |

a)/Mo49/, b)/McG75b/.

Tab. 6.6 Identifikation von Termen der Konfiguration $3p^3nl$ und des Terms $3s^0(^1S^e)$. Bei den Liniennummern gehört die erste Zahl zum $L_3$-, die zweite zum $L_2$-Anfangszustand. Eingeklammerte Linien sind nicht vom Typ I. Bei doppelt klassifizierten Linien wurden die Intensitäten nach Möglichkeit so aufgeteilt, daß innerhalb eines Doubletts wie theoretisch erwartet die erste Linie doppelt so intensiv wie die zweite war. Die Term-Energien sind eingeteilt in die in dieser Arbeit gemessenen Werte (A), die bekannten optischen Daten (B) /Mo49/ und die in dieser Arbeit in LS-Kopplung berechneten Energien (C). Bei den Rechnungen wurden die Termenergien jeweils relativ zu optisch gemessenen Energien von Termen der gleichen Konfiguration ermittelt.

auch in anderen Doubletts vorkommen, wäre es möglich, daß dies ein zufälliges Doublett ist, das dadurch entstanden ist, daß zwei Endzustände den zweifachen $L_2$-$L_3$-Abstand haben. Die Intensitäten der Linien waren leider nicht genau genug zu bestimmen, um evtl. das Doublett E auszuschließen.

Zwar ist die Termenergie des $M_1^2$-Zustandes nicht bekannt, doch wurden in optischen Messungen zahlreiche $Ar^{2+}$-Zustände der Art $3p^3nl$ um 30-40 eV nachgewiesen /Mo49/. Diese bekannten Energien sollen nun mit den hier gemessenen Energien verglichen werden, um möglichst viele gemessene Terme zu identifizieren. In dem untersuchten Energiebereich liegen sehr viele optisch gemessene Terme höherer Multiplizität, aber keine Singlett-Terme. Deshalb muß man zunächst sehen, welche Terme als Endzustände der intensivsten Linien im Augerspektrum in Frage kommen, und dann evtl. die Singlett-Terme noch berechnen.

Am intensivsten wird man Übergänge zu solchen Endzuständen beobachten, die mit den Endzuständen der Diagrammlinien in Konfigurationswechselwirkung treten können. Da die Konfigurationswechselwirkung um so kleiner wird, je weiter die Terme voneinander energetisch entfernt sind, wird man zunächst die $M_{23}^2$-Terme vernachlässigen können und nur nach Termen suchen müssen, die mit den Termen $M_1M_{23}(^1P^o)$, $M_1M_{23}(^3P^o)$ und $M_1^2(^1S^e)$ Konfigurationswechselwirkung zeigen. Also braucht man aus den optischen Daten /Mo49/ nur $^3P^o$-Niveaus zu betrachten, wie sie in der ersten Spalte in Abb. 6.1 eingetragen sind. Ein $^3S^e$-Niveau wurde nur zur Normierung einer Rechnung eingetragen.

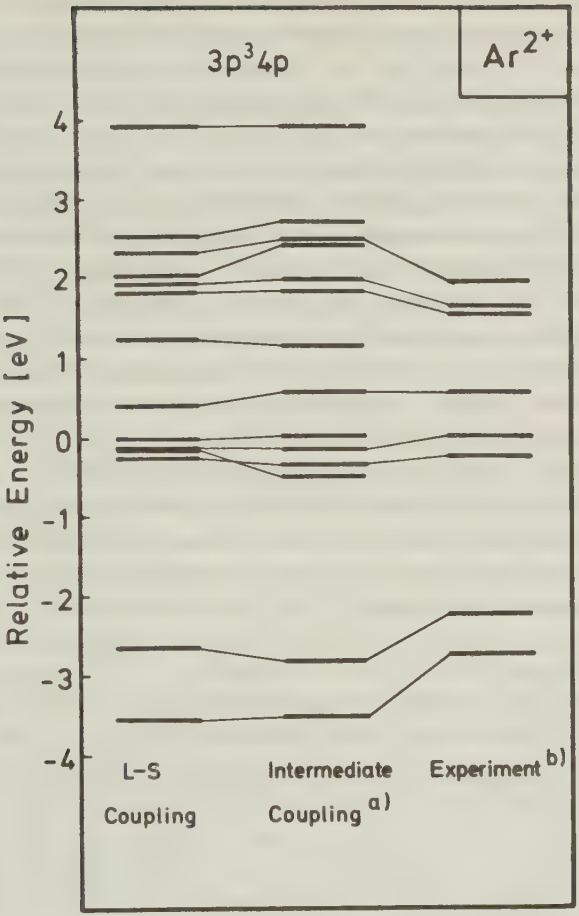
Die $^1P^o$- und $^1S^e$-Niveaus müssen berechnet werden. Da absolute Termenergien aus Hartree-Fock-Rechnungen nicht hinreichend genau sind, wurden diese Niveaus jeweils relativ zu optisch gemessenen Termen der gleichen Konfiguration berechnet. Diese relativen Energien wurden nach den bekannten Ausdrücken für die Termenergien /Sla60/ bestimmt mit Hilfe von Slaterintegralen aus eigenen Hartree-Fock-Rechnungen /FF72/ für die entsprechenden Konfigurationen. Nur im Fall des Terms $(3p^3)^2D(5d)^1P^o$

mußte die Energie relativ zu einer anderen Konfiguration, nämlich $3p^3 5s$, bestimmt werden. Diese Termenergie ist deshalb um 1-2 eV unsicher. Sämtliche Rechnungen wurden in LS-Kopplung durchgeführt unter Vernachlässigung der Konfigurationswechselwirkung. Die Konfigurationswechselwirkung könnte noch zu Verschiebungen einiger Termenergien im Bereich von $\pm 1$ eV führen.

Für die Konfiguration $3p^3 4p$ wurde die gesamte Multiplettaufspaltung berechnet und mit optischen Daten verglichen (s. Abb. 6.3). In der ersten Spalte ist das Ergebnis für reine LS-Kopplung gezeigt. In der zweiten Spalte wurde die Spin-Bahn-Wechselwirkung bei der Diagonalisierung der Energiematrix zwischen Termen mit gleichem L und S berücksichtigt. Es wurde lediglich der größte Beitrag berechnet, der von den 3p-Elektronen kommt. Man sieht, daß die Spin-Bahn-Wechselwirkung fast vernachlässigbar ist. Außerdem erkennt man beim Vergleich mit der gemessenen Aufspaltung, daß keine wesentliche Verzerrung des Termschemas durch Konfigurationswechselwirkung vorliegt. Für andere $3p^3 nl$-Konfigurationen würde man jedoch starke Konfigurationswechselwirkung erwarten. Man erkennt in Abb. 6.3 ferner, daß die Gesamtaufspaltung etwa 15% zu groß berechnet wurde.

In Abb. 6.1 sind die Energien der Triplett-Niveaus aus den optischen Messungen aufgetragen /Mo49/. In der zweiten Spalte finden sich die in dieser Arbeit berechneten Termenergien zusammen mit den beobachtbaren Termen aus der ersten Spalte, die gestrichelt eingezeichnet sind. Dabei markieren Verbindungslinien, bezüglich welcher der optischen Terme die berechneten normiert wurden. In der nächsten Spalte finden sich die hier gemessenen Energien, daneben die von McGuire /McG75b/ aus dem Spektrum von Werme et.al. /WBS73/ bestimmten Termenergien. Für die Kennzeichnung der Terme wird teilweise die Numerierung McGuires mit kleinen Buchstaben benutzt; für die Numerierung in dieser Arbeit werden große Buchstaben verwendet.

In Tab. 6.6 ist das Ergebnis aus dem Vergleich der optischen Daten und der berechneten Energien mit den ge-




a) Spin-Bahn-Wechselwirkung nur näherungsweise berücksichtigt

b) /Mo49/

Abb. 6.3 Gemessene und berechnete Multiplettaufspaltung für $3p^3 4p$. Die Terme sind in der Reihenfolge abnehmender Energie:
$(^2P)\,^1S, ^1D, ^3P, ^1P, ^3D, ^3S$; $(^2D)\,^1D, ^3P, ^1F, ^3F, ^1P, ^3D$;
$(^4S)\,^3P, ^5P$.

messenen Termenergien wiedergegeben. Gute Übereinstimmung auch mit McGuires Klassifikation zeigt sich für die Terme A, B, C. Die Untersuchung der Linienintensitäten führte zum Ausschluß des Doubletts c, dessen eine Linie schon im Doublett d enthalten ist.

Die erste große Diskrepanz scheint bei dem Linienpaar e aufzutreten. McGuire /McG75b/ argumentierte aber, daß hier Konfigurationswechselwirkung das $(3p^3)^2D(3d)^1P^o$-Niveau von der in dieser Arbeit berechneten Lage anhebt, während sie das nach der Rechnung zu hoch liegende $3s3p^5(^1P^o)$-Niveau absenkt. Diese Konfigurationswechselwirkung ist vom Typ $3p^2$-3s3d und sollte erfahrungsgemäß einen großen Einfluß haben /Lu77/. Deshalb ist hier wohl McGuires Identifikation zutreffend.

Beim Term f wurde die Verschiebung gegenüber der hier berechneten Lage ebenfalls mit starker Konfigurationswechselwirkung begründet. Die betreffenden Konfigurationen, die hier angeblich mischen sollten, unterscheiden sich jedoch um drei Elektronen:

$$3s^03p^6 - 3s^23p^34p \quad \hat{=} \quad 3p^3 - 3s^24p$$

Der Operator der Coulomb-Wechselwirkung $1/r_{ij}$ läßt aber keine direkte Mischung dieser Konfigurationen zu. Die Konfigurationswechselwirkung ist also vernachlässigbar. Da die Rechnung dieser Arbeit zeigt, daß sich dieser Termenergie kein Term zuordnen läßt, könnte man annehmen, daß dieses Doublett wirklich wie schon vermutet ein zufälliges Doublett ist. Der von McGuire für diese Energie angegeben Term $(3p^3)^2P(4p)^1S^e$ liegt nach dieser Arbeit in der Nähe des Doubletts G.

Die Energie des Terms $3s^0(^1S^e)$ wurde von Froese-Fischer wie schon in Abschnitt 6.2 erwähnt unter Berücksichtigung der Konfigurationswechselwirkung mit den Termen $3s^23p^4(^1S^e)$, $3s3p^4(^2D)3d(^1S^e)$ und $3s^23p^3(^2P)4p(^1S^e)$ berechnet /FF77/. Für den letztgenannten Term gibt es zwar keine direkte Konfigurationswechselwirkung mit dem $3s^0$-Term, aber die Rechnung lieferte dann die relative Energie des $3s^0$-Terms bezüglich des $3s^23p^3(^2P)4p(^1S^e)$-Terms. Sie beträgt -0,035 eV. Innerhalb der Zeichengenauigkeit der Abb. 6.1

würden die beiden Terme zusammenfallen. Innerhalb der Unsicherheiten der Rechnung kommt das Linienpaar G für diese beiden Terme in Frage.

In Abb. 6.3 wurde die berechnete Termaufspaltung für die Konfiguration $3p^3 4p$ mit gemessenen Energien /Mo49/ verglichen. Dabei zeigte sich erstens, daß sich diese Konfiguration gut in LS-Kopplung rechnen läßt, und zweitens, daß die berechneten Termabstände alle um etwa 15% zu groß sind. Korrigiert man die Termenergie des $3p^3(^2P)4p(^1S)$-Terms, die bzgl. des optisch gemessenen Terms $3p^3(^2P)4p(^3S)$ berechnet wurde, für diese Abweichung von 15%, so erhält man sehr gute Übereinstimmung mit gemessenen Energie des Terms G. Die Energie für den Term $3s^0(^1S^e)$ ist dann 31,60 eV, während für G 31,56 eV gemessen wurde. Der Term $3p^3(^2P)4p(^1S^e)$ liegt bei 31,64 eV.

Es ist nun die Frage, ob die Übergänge $L_{2,3}$-$M_1^2(^1S^e)$ oder $L_{2,3}$-$3p^3(^2P)4p(^1S^e)$ wahrscheinlicher sind. Es ist anzunehmen, daß der Diagrammübergang intensiver ist als der Übergang in den Endzustand $3p^3(^2P)4p(^1S^e)$, der nur über Konfigurationswechselwirkung mit dem ca. 30 eV entfernten Zustand $3p^4(^1S^e)$ bevölkert wird. Somit entspricht das Doublett G, d.h. die Linien 60 und 66, den Übergängen $L_3$-$M_1^2(^1S^e)$ und $L_2$-$M_1^2(^1S^e)$ (s. Abb. 6.2).

Die vollständige Klassifikation der betrachteten Terme ist in Tab. 6.6 zusammengefaßt. Die Tabelle enthält neben den mit großen Buchstaben bezeichneten Linien noch zwei unklassifizierte Linien. Diese sind relativ schwach und gehören möglicherweise zu den hier vernachlässigten Termen $(^1D^e)$ und $(^3P^e)$, die durch Konfigurationswechselwirkung mit Termen der Konfiguration $M_{23}^2$ bevölkert werden können.

# 7. $L_{23}M$-$M^3$-Satelliten

## 7.1 Untersuchung der $L_{23}M_{23}$-$M_1^2M_{23}$-Satelliten

Die drei intensivsten Linien des $L_{23}M_{23}$-$M_1^2M_{23}$-Spektrums wurden bereits von McGuire /McG75b/ in dem von Werme et.al. /WBS73/ gemessenen Spektrum bei etwa 160 eV lokalisiert. Diese Identifikation basierte auf der berechneten Multiplettaufspaltung des Endzustandes und auf berechneten Intensitäten. Diese Lage der $L_{23}M_{23}$-$M_1^2M_{23}$-Gruppe ergibt sich auch aus der Berechnung der Schwerpunktsenergie in Kap. 4. Es werden in diesem Kapitel an dieser der Struktur nach einfachsten Gruppe innerhalb der $L_{23}M$-$M^3$-Satelliten neuere gemessene und berechnete Energien für die Anfangszustände $L_{23}M_{23}$ mit den beobachteten Linienlagen verglichen und weitere Linien klassifiziert. Dadurch können auch für eine größere Zahl von Linien die Intensitäten mit Rechnungen verglichen werden. Diese Betrachtungen bilden die Grundlage für die weitere Identifizierung von Linien der Gruppen $L_{23}M_{23}$-$M_1M_{23}^2$ und $L_{23}M_{23}$-$M_{23}^3$, die zum Teil stark überlappen, weil auch die Endzustände $M_1M_{23}^2$ und $M_{23}^3$ in mehrere Terme aufspalten.

Da die Identifikation der drei intensivsten $L_{23}M_{23}$-$M_1^2M_{23}$-Linien durch McGuire nur auf berechneten Energien und Intensitäten beruht, wird diese Gruppe noch einmal untersucht. In den gemessenen Spektren erkennt man, daß in dem zu betrachtenden Energiebereich von 160 bis 170 eV die Linien nicht so stark überlappen wie bei höheren Energien zwischen 175 und 200 eV. Deshalb eignet sich diese Gruppe am besten zur Überprüfung der Hilfsmittel für die Linienklassifizierung.

Zunächst müssen alle Kandidaten für $L_{23}M_{23}$-$M_1^2M_{23}$-Übergänge Linien vom Typ II sein. Das sind aber im Bereich zwischen 160 und 170 eV etwa 70% aller Linien. Also braucht man noch Informationen über die Energielagen und Intensitäten.

Tab. 7.1 Gemessene und berechnete Energien von Termen der Konfiguration $L_{23}M_{23}^2$ in eV. Die Daten dieser Arbeit wurden aus den Übergangsenergien für $L_{23}M_{23}-M_1M_{23}$ abgeleitet. Die Fehler liegen zwischen ±10 meV für intensive schmale Linien und ±50 meV für breite Linien. Die anderen Autoren geben Fehler von ±10 meV an, Nordgren et.al. sogar weniger als ±10 meV.

| Initial Term | experimental Data | | | | | Theoretical Data | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | This work | Nordgren et.al.[a] | Werme et.al.[b] $M_{23}^2(^1S)$ | Werme et.al.[b] $M_{23}^2(^3P)$ | Mehlhorn[c] | This work | McGuire[d] |
| $^1P_1$ | -0.30 | -0.295 | -0.30 | -0.30 | -0.30 | -0.32 | -0.22 |
| $^3D_3$ | 0.00* | 0.000* | 0.00* | 0.00* | 0.00* | 0.00* | 0.00* |
| $^3D_2$ | 1.01 | 1.049 | 1.17 | 1.17 | 0.85 | 0.86 | 0.68 |
| $^3S_1$ | 1.89 | 1.850 | ... | ... | 1.35 | 1.38 | 0.86 |
| $^3P_2$ | ... | 2.109 | ... | ... | 2.16 | 2.27 | 1.51 |
| $^3D_1$ | 2.22 | 2.220 | 2.34 | 2.32 | 2.26 | 2.31 | 2.11 |
| $^3P_0$ | ... | 3.308 | ... | ... | 2.98 | 3.16 | 2.27 |
| $^3P_1$ | ... | 3.556 | ... | ... | 3.40 | 3.64 | 3.09 |
| $^1D_2$ | ... | 4.420 | 4.27 | 4.22 | 4.26 | 4.61 | 3.56 |
| $^1S_0$ | ... | 6.483 | ... | 6.43 | 6.13 | 7.77 | 4.96 |

*Normalized

a)/NANS76/, b)/WBS73/, c)/Me68/, d)/McG75b/.

Experimentelle Energien für die Anfangszustände $L_{23}M_{23}$ wurden erstmals von Mehlhorn /Me68/ angegeben. Diese Daten (s. Tab. 7.1) stammen aus einem Fit des Coster-Kronig-Spektrums $L_1$-$L_{23}M_{23}$. Da die Coster-Kronig-Übergänge aber natürliche Linienbreiten von (1,8±0,2) eV besitzen und deshalb stark überlappen, mußten zur Reduzierung der freien Parameter des Fits einige Annahmen über die Multiplett-Aufspaltung gemacht werden. Dazu wurden die Spin-Bahn-Parameter abgeschätzt, so daß nur noch drei Slaterintegrale aus dem Fit zu bestimmen waren. Mit diesen Daten wurde dann die Aufspaltung des gesamten Multipletts einschließlich der nicht beobachteten schwachen Linien ausgerechnet.

Weitere experimentelle Energien in Tab. 7.1 wurden der Arbeit von Werme et.al. /WBS73/ entnommen. Diese Werte entstammen einer Klassifikation einiger Satellitenlinien zwischen 190 und 200 eV. Sie umfassen aber nicht alle möglichen Terme. Die Klassifikation richtete sich nach einer relativistischen Hartree-Fock-Rechnung.

Die neuesten experimentellen Daten wurden hier aus absoluten Energien für optische Übergänge der Art $L_{23}M_{23}$-$M_1M_{23}$ gewonnen, die von Nordgren et.al. /NANS76/ veröffentlicht wurden. Diese Energien sind einerseits auf ±10 meV genau gemessen worden, andererseits sollte auch die Klassifikation der Linien eindeutig sein, da in dem gemessenen Spektrum die Linien sehr gut aufgelöst werden konnten. Die Klassifikation in Röntgenspektren ist auch schon deshalb einfacher, weil die Satelliten von verschieden stark ionisierten Anfangszuständen dort im Gegensatz zu den Augerspektren meist nicht überlagert sind /KHWR73/. Aus all diesen Gründen ergeben diese Daten die zuverlässigsten Werte für relative Energien.

Um relative Energien für die $L_{23}M_{23}$-Terme aus Nordgrens Übergangsenergien zu berechnen, muß man berücksichtigen, daß die Endzustände verschieden sind. Für die Konfiguration $M_1M_{23}$ des Endzustandes gibt es die Terme $^1P_1$ und $^3P_{0,1,2}$. Die Feinstruktur des $^3P$-Terms

wurde zwar nicht aufgelöst, dennoch muß man berücksichtigen, daß auf Grund der optischen Auswahlregeln nicht immer alle Niveaus besetzt werden können. Das führt zu entsprechenden Verschiebungen des Linienschwerpunkts. Sämtliche gemessenen Übergangsenergien wurden deshalb unter Benutzung optischer Daten /Mo49/ für den Term $^1P$ und die Niveaus des $^3P$-Terms umgerechnet auf den Endzustand $^3P_2$. Der Korrekturterm für Übergänge in den $^3P$-Term ist dann von der Form:

$$\frac{\sum_{i'}(2J_{i'}+1)\cdot E(^3P_{J_{i'}})}{\sum_{i'}(2J_{i'}+1)} - E(^3P_2) \quad ,$$

wobei über die jeweils optisch erlaubten $J_{i'}$ summiert wurde.

Tab. 7.1 zeigt, daß Mehlhorns Energien /Me68/ teilweise bis zu 0,5 eV von Nordgrens Daten abweichen, aber die Gesamtaufspaltung recht gut wiedergeben. Die von Mehlhorn abgeschätzten Spin-Bahn-Parameter stimmen gut mit Rechnungen dieser Arbeit überein. Dagegen sind aber die aus dem Fit des Coster-Kronig-Spektrums ermittelten Slaterintegrale um teilweise 0,5 eV kleiner als hier berechnete Werte (s. Tab. 7.2), die zu guter Übereinstimmung mit Nordgrens Energien führen.

Abweichungen von bis zu 200 meV zeigen sich in den Daten von Werme et.al. /WBS73/. Das liegt daran, daß einige Linienklassifikationen nicht mit den relativen Energien von Nordgren et.al. übereinstimmen. Es sind die Übergänge $L_{23}M_{23}(^3D_1)$-$M^3_{23}(^2P)$, $L_{23}M_{23}(^3D_1)$-$M^3_{23}(^2D)$, $L_{23}M_{23}(^1D_2)$-$M^3_{23}(^2P)$ und $L_{23}M_{23}(^1D_2)$-$M^3_{23}(^2D)$. In dem linienreichen Spektrum zwischen 190 und 200 eV gibt es so viele Linien, daß man zur eindeutigen Klassifikation sehr genaue Relativenergien braucht. Diese standen Werme et.al. noch nicht zur Verfügung. Auch hatten sie noch keine Daten über Linienintensitäten , um ihre Klassifikation zu überprüfen.

Die in dieser Arbeit gemessenen Energien, die noch

durch die Übereinstimmung der relativen Intensitäten mit theoretischen Werten McGuires /McG75b/ und durch die Zugehörigkeit zum Typ II zusätzlich gesichert sind, zeigen sehr gute Übereinstimmung mit Nordgrens Daten (s. Tab. 7.1). Die relativen Energien von Nordgren et.al. werden deshalb zur Identifizierung weiterer Linien der Gruppen $L_{23}M_{23}$-$M_1M_{23}^2$ und $L_{23}M_{23}$-$M_{23}^3$ herangezogen.

Berechnete Energien für die Terme der Konfiguration $L_{23}M_{23}$ wurden von McGuire angegeben /McG75b/. Er berechnete die relativen Abstände der Multiplett-Terme in intermediärer Kopplung, denn wie in Abschnitt 1.2 angedeutet, sind für LM-Zustände die elektrostatische und die Spin-Bahn-Aufspaltung von gleicher Größenordnung. Für die Rechnung benutzte McGuire tabellierte Slaterintegrale /Ma67/. Es ist jedoch nicht klar, welche Spin-Bahn-Parameter verwendet wurden. Die verwendeten Slaterintegrale aus Manns Tabellen wurden allerdings nicht für die Konfiguration $L_{23}M_{23}$ berechnet, sondern für das neutrale Argon-Atom. Eine Rechnung dieser Arbeit für $L_{23}M_{23}$ zeigt, daß die für die Multiplettaufspaltung wichtigen Slaterintegrale des neutralen Atoms bis zu o,5 eV zu klein sind (s. Tab. 7.2). Infolgedessen ist auch die von McGuire berechnete Aufspaltung zu klein.

Zur Überprüfung der Klassifikation von Nordgren et.al. /NANS76/, und um die Genauigkeit der Hartree-Fock-Rechnungen zu überprüfen, wurden eigene Rechnungen für die Terme der Konfiguration $L_{23}M_{23}$ in intermediärer Kopplung durchgeführt. Das Ergebnis ist zusammen mit den Energien von Nordgren et.al. und McGuire in Abb. 7.1 gezeigt. Die Schwerpunktsenergie $E_{av}$ des Multipletts wurde jeweils von den Termenergien subtrahiert. Zur Berechnung der Multiplettaufspaltung wurden die Ausdrücke für die Termenergien in LS-Kopplung nach Slater /Sla60/ und die Spin-Bahn-Matrix nach Condon und Shortley /CS70/ benutzt. Es wurden die in Tab. 7.2 aufgeführten Slaterintegrale und folgende Spin-Bahn-Parameter benutzt:

$$\zeta_{2p} = 1{,}432 \text{ eV} \quad , \zeta_{3p} = 0{,}142 \text{ eV}.$$

Tab. 7.2 Slaterintegrale für $L_{23}M_{23}$-Multipletts.

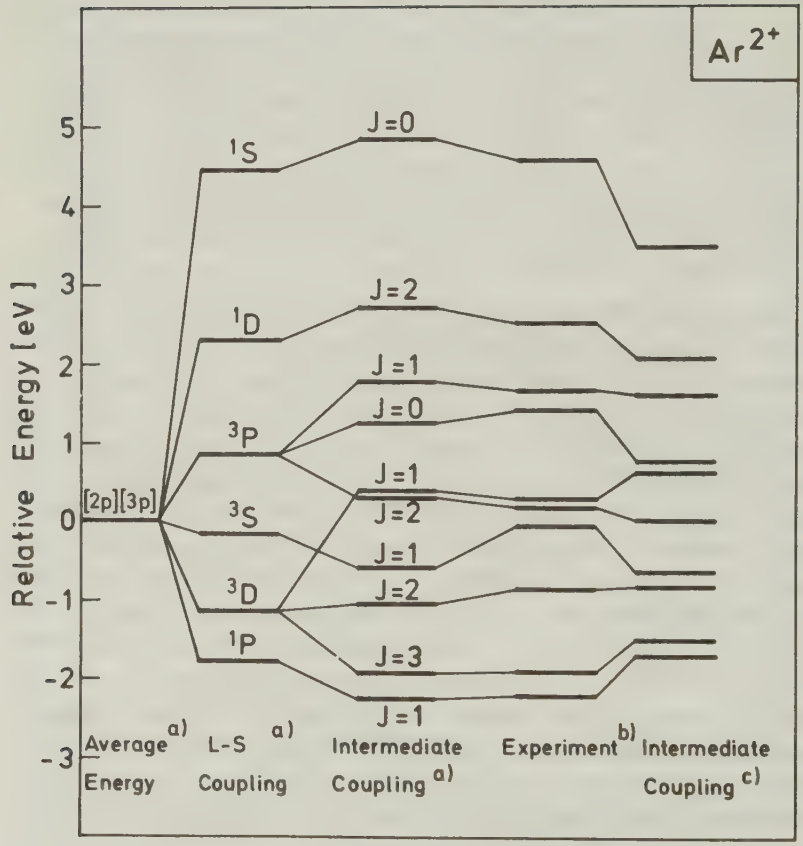
| Integral | This Work [eV] | Mehlhorn[a)] [eV] | McGuire[b)] [eV] |
|---|---|---|---|
| $F^2(2p3p)$ | 4.357 | 3.80 | 3.242 |
| $G^0(2p3p)$ | 1.641 | 1.50 | 1.195 |
| $G^2(2p3p)$ | 1.696 | 1.25 | 1.212 |

a) /Me68/, b)/McG75b/.

Es muß an dieser Stelle noch auf ein allgemeines Problem bei Hartree-Fock-Rechnungen hingewiesen werden, das sich bei der Konfiguration $L_{23}M_{23}$ sehr deutlich zeigte. Die Rechnungen ergaben nämlich, daß man unrealistische Werte für die Slaterintegrale erhält, wenn man die Hartree-Fock-Rechnung für die Terme $^1S$, $^3P$ oder $^1D$ durchführt. Auch ergeben sich dann unrealistische Werte für die Spin-Bahn-Parameter. Bemerkenswert aber war, daß die Summe über die Spin-Bahn-Parameter $\zeta_{2p}+\zeta_{3p}$ stets gleich war, unabhängig davon, ob sie aus Rechnungen für die Terme $^1S$, $^3P$, $^1D$ oder $^3S$, $^1P$, $^3D$ stammten. Diese Beobachtung und die Tatsache, daß das Hartree-Fock-Verfahren die Energie stets minimalisiert für gegebenes L und S, deuten darauf hin, daß für die Terme $^1S$, $^3P$ und $^1D$ die Wellenfunktionen "rotiert" werden und dadurch zu den Wellenfunktionen der Grundzustandsterme $^1S$, $^3P$ und $^1D$ der Konfiguration $2p^63p^4$ hin konvergieren:

$$\phi'_{2p} = \phi_{2p} + \epsilon\phi_{3p}$$
$$\phi'_{3p} = -\epsilon\phi_{2p} + \phi_{3p} \ .$$

Dieses "Abrutschen" der Rechnung tritt immer dann auf, wenn man einen Term der Konfiguration $L_{23}M_{23}$ rechnet, der auch für die energetisch tiefer liegende Konfiguration $2p^63p^4$ erlaubt ist wie $^1S$, $^3P$ und $^1D$. Eine realistische Multiplettaufspaltung läßt sich dann nur berechnen, indem man eine Rechnung für einen der Terme $^3S$, $^1P$ oder $^3D$ durch-




a) This Work, b)/NANS76/, c)/McG75b/

Abb. 7.1 Berechnete und gemessene Termenergien für die Konfiguration $L_{23}M_{23}$. Die Rechnungen dieser Arbeit (a) wurden mit einem Hartree-Fock-Programm /FF72/ durchgeführt, während McGuire (c) /McG75b/ tabellierte Werte der Slaterintegrale für die Aufspaltung benutzte /Ma67/. Die experimentellen Energien (b) stammen aus Messungen optischer Übergänge von Nordgren et.al. /NANS76/.

führt, die nicht zu tiefer liegenden Zuständen konvergieren kann, und dann mit den daraus resultierenden Slaterintegralen und dem Spin-Bahn-Parameter die Multiplettaufspaltung berechnet. In dieser Arbeit wurden die Slaterintegrale und Spin-Bahn-Parameter aus einer Rechnung für den $^3$D-Term verwendet.

Kürzlich konnte Froese-Fischer in einer Multikonfigurations-Rechnung zeigen, daß sich auch für die Terme $^1$S, $^3$P und $^1$D realistische Slaterintegrale berechnen lassen, wenn man das "Rotieren" der p-Wellenfunktionen verhindert. Eine weitere Multikonfigurationsrechnung wurde dann noch unter gleichzeitiger Berücksichtigung von Konfigurationswechselwirkung und Spin-Bahn-Wechselwirkung von Froese-Fischer durchgeführt /FF77/. Es wurden die Konfigurationen $3p^4$, $2s3s$, $2p^53s3p^53d$ und $2s3p^43d$ mit insgesamt 55 Termen mitgenommen. Das Ergebnis ist eine sehr gute Übereinstimmung des Aufspaltungsmusters mit den Daten von Nordgren et.al. /NANS76/. Demzufolge sind die Abweichungen der experimentellen Daten von den in dieser Arbeit berechneten Energien auf die Konfigurationswechselwirkung zurückzuführen. Die Rechnung von Froese-Fischer zeigt eine Vertauschung der Terme $^3D_1$ und $^3P_2$ gegenüber den Rechnungen dieser Arbeit und der Klassifikation von Nordgren et.al.. Die in dieser Arbeit gemessenen Energien und Intensitäten sprechen aber für die bisherige Klassifikation, wie weiter unten diskutiert wird.

Vergleicht man die berechneten Energien McGuires /McG75b/ und dieser Arbeit mit den optischen Daten (s. Tab. 7.1 und Abb. 7.1), so beobachtet man sehr gute Übereinstimmung der hier berechneten Energien mit dem Experiment. Dies bestätigt auch die von Nordgren et.al. benutzte Nomenklatur.

McGuires Rechnung der Niveaus zeigt dagegen Abweichungen von teilweise 1 eV, während die vorliegende Rechnung nur in einem Fall um 500 meV abweicht, sonst aber unter $\Delta E$=300 meV bleibt. Es wurde von McGuire vermutet, daß die Abweichungen durch Konfigurationswechselwirkung entstehen. Grundlage der Vermutung war die Tatsache, daß das $^1S_0$-

Niveau besonders starke Abweichungen aufwies.. Das wäre bei Konfigurationswechselwirkung zu erwarten, da fast jede Konfiguration von $Ar^{2+}$ einen $^1S_0$-Term enthält, die fast alle mit dem $^1S_0$-Term der hier betrachteten Konfiguration $L_{23}M_{23}$ mischen können. Die Rechnungen dieser Arbeit zeigen jedoch, daß für die $L_{23}M$-$M^3$-Satellitenlinien die Konfigurationswechselwirkung keine sehr große Rolle spielt. Vielmehr ist es notwendig, in intermediärer Kopplung zu rechnen und Slaterintegrale und Spin-Bahn-Parameter aus Hartree-Fock-Rechnungen der betreffenden Konfiguration zu verwenden. In Tab. 7.2 sind die von McGuire benutzten Slaterintegrale aus Manns Tabellen gezeigt. Sie weichen stark von den hier berechneten Werten ab. Die Hauptursache für die Abweichung von McGuires Daten vom Experiment ist also die zu kleine elektrostatische Wechselwirkung.

Da aber neben den Energien auch berechnete Intensitäten eine wichtige Rolle bei der Identifikation von Linien spielten, sollen im Folgenden die berechneten Intensitäten untersucht und für die $L_{23}M_{23}$-$M_1^2M_{23}$-Übergänge mit dem Experiment verglichen werden. Die experimentellen Intensitäten wurden aus dem durch 2,5-keV-$e^-$ angeregten Spektrum bestimmt. Ein Vergleich mit Intensitäten nach Anregung durch die langsameren Projektile $H^+$ und $He^+$ ist nicht sinnvoll, da in diesen Fällen die Anfangszustände auch durch Zweifachstoßprozesse angeregt werden, die in den theoretischen Daten nicht berücksichtigt wurden.

Die Intensität $I_{if}$ einer Spektrallinie ergibt sich aus der Wahrscheinlichkeit $P_i$, mit der der Anfangszustand i bevölkert wird, der Zerfallswahrscheinlichkeit $w_{if}$ in den Endzustand f und der totalen Zerfallswahrscheinlichkeit $A_{tot}=\sum_{f'} w_{if'}$, zu:

$$I_{if} = P_i \cdot \frac{w_{if}}{\sum_{f'} w_{if'}}$$

Es gibt zwei Wege, die Anfangszustände $L_{23}M_{23}$ bzw. $L_{23}M_1$ zu bevölkern. Erstens kann ein Loch in der $L_1$-Schale durch einen Coster-Kronig-Übergang in den $L_{23}M_{23}$ bzw. $L_{23}M_1$ Zu-

stand zerfallen. Zweitens kann es passieren, daß bei der Ionisation der 2p-Schale durch die plötzliche Änderung der Kernabschirmung ein M-Elektron entweder durch den "shake-up" Prozeß auf eine freie höhere Bahn gehoben wird, oder durch "shake-off" ins Kontinuum emittiert wird. Dadurch entsteht ebenfalls ein $L_{23}M_{23}$- oder $L_{23}M_1$-Zustand. Im Fall des Krypton M-Augerspektrums konnte gezeigt werden, daß "shake-off" und auch "shake-up" mit sofortiger Autoionisation des angeregten Elektrons nicht vorkommen /McG75a/. Diese Daten waren aber in Einklang mit "shake-up", wobei dann der Satellitenübergang stattfindet, bevor ein $L_{23}M_{23}$- oder $L_{23}M_1$-Zustand entstehen kann, d.h. bevor das angeregte Elektron emittiert wird. Solche Prozesse führen zu den Endzuständen $M_{23}^3(nl)$ mit einem Elektron nl in einer Bahn oberhalb der 3p-Schale oder, falls das angeregte Elektron am Augerübergang teilnimmt, zu Endzuständen $M_{23}^2$ . Diese Übergänge führen zu einer Vielzahl von Linien. Man kann jedoch annehmen, daß keine von diesen Linien besonders intensiv ist, so daß sie nur einen mehr oder weniger strukturlosen Untergrund im Spektrum bilden.

Da die Elektronenkonfigurationen der Edelgase sehr ähnlich sind, kann man auch für Argon annehmen, daß die Zustände $L_{23}M_{23}$ und $L_{23}M_1$ allein durch den Coster-Kronig-Prozeß bevölkert werden. Man kann deshalb für die Anfangsbevölkerungswahrscheinlichkeiten experimentelle oder theoretische Coster-Kronig-Raten einsetzen. Die theoretischen Übergangswahrscheinlichkeiten sind von McGuire in LS-Kopplung berechnet worden /McG71/ und müssen mit Hilfe der Mischungskoeffizienten, die sich aus der Diagonalisierung der Spin-Bahn-Matrix ergeben, in intermediäre Kopplung transformiert werden. Tab. 7.5 zeigt Coster-Kronig-Raten verschiedener Autoren. Sie stimmen in den relativen Verhältnissen ungefähr überein. Die Daten sind so normiert, daß die Summe über die Intensitäten der $L_1$-$L_{23}M_1$-Übergänge gleich 100 ist. Es zeigt sich, daß die theoretischen Werte für die $L_1$-$L_{23}M_1$-Übergänge zu hoch liegen. Das spiegelt sich später in zu hohen theore-

tischen Intensitäten für die $L_{23}M_1$-$M^3$-Übergänge wider.

Es wurden nun die experimentellen Coster-Kronig-Raten von Mehlhorn benutzt /Me68/, um zusammen mit den von McGuire angegebenen Übergangswahrscheinlichkeiten die Intensitäten für die $L_{23}$M-$M^3$-Satelliten zu berechnen. Anhand dieser halbempirischen Intensitäten und mit relativen Energien für die Anfangszustände nach Nordgren und Mitarbeitern /NANS76/ und mit relativen Energien für die Endzustände von Moore /Mo49/ sind theoretische

Tab. 7.3 $L_1$-$L_{23}$M-Coster-Kronig-Übergangswahrscheinlichkeiten. Die Daten wurden so normiert, daß stets die Gesamtintensität aller $L_1$-$L_{23}M_{23}$-Übergänge 100 ergibt.

| Transition | Theoretical Data | | | Experiment |
|---|---|---|---|---|
| | This Work[a] | McGuire[b] | Mehlhorn[c] | Mehlhorn[c] |
| $L_1$-$L_{23}M_1$($^1P_1$) | 51.6 | 58.3 | 47.7 | 15.0 |
| ($^3P_0$) | | 3.9 | | |
| ($^3P_1$) | 70.4 | 45.8 | 53.1 | 11.3 |
| ($^3P_2$) | | 0.3 | | |
| $L_1$-$L_{23}M_{23}$($^1P_1$) | 2.0 | 2.1 | 2.7 | 1.6 |
| ($^3D_3$) | 18.6 | 18.6 | 25.9 | 24.1 |
| ($^3D_2$) | 12.1 | 12.1 | 13.9 | 15.7 |
| ($^3S_1$) | 14.5 | 13.5 | 7.7 | 8.2 |
| ($^3P_2$) | 1.8 | 1.7 | 6.3 | 2.9 |
| ($^3D_1$) | 8.2 | 7.6 | 9.1 | 8.9 |
| ($^3P_0$) | 3.2 | 5.4 | 5.5 | 3.1 |
| ($^3P_1$) | 3.5 | 4.9 | 3.0 | 1.9 |
| ($^1D_2$) | 8.9 | 9.0 | 13.5 | 13.8 |
| ($^1S_0$) | 27.2 | 25.2 | 12.3 | 19.8 |

a) Benutzt wurden Mischungskoeffizienten aus den Energieberechnungen in intermediärer Kopplung und LS-Übergangswahrscheinlichkeiten aus /McG71c/, b)/McG75b/, c)/Me68/.

Spektren erzeugt worden, die mit den gemessenen Spektren verglichen wurden. Dieser Vergleich erleichterte die Identifizierung vieler Linien vom Typ II.

In Tab. 7.4 sind die hier gemessenen relativen Intensitäten einiger $L_{23}M_{23}$-$M_1^2M_{23}$-Übergänge verglichen mit den von McGuire berechneten Werten /McG75b/. Man sieht, daß alle intensiven Linien im Spektrum gefunden wurden und auch in ihren relativen Intensitäten gut mit der Theorie

Tab. 7.4 Relative Intensitäten für $L_{23}M_{23}$-$M_1^2M_{23}$. Die Fehler der experimentellen Daten liegen bei ±4 rel. Einh..

| Initial State | Experiment This Work | Theory McGuire[a)] |
|---|---|---|
| $^1P_1$ | 25 | 6 |
| $^3D_3$ | 100* | 100* |
| $^3D_2$ | 17 | 12 |
| $^3S_1$ | 12 | 9 |
| $^3P_2$ | ... | 0.3 |
| $^3D_1$ | 59 | 38 |
| $^3P_0$ | ... | 1 |
| $^3P_1$ | ... | 1 |
| $^1D_2$ | ... | 2 |
| $^1S_0$ | ... | 5 |

*Normalized arbitrarily

a)/McG75b/.

übereinstimmen. Eine größere Abweichung zeigt sich für den Anfangszustand $^1P_1$. In diesem Fall hat die Untersuchung der Intensitäten bei Anregung durch verschiedene Projektile gezeigt, daß diese Linie von einer Satellitenlinie des Typs I überlagert wird. Man beobachtet zwar auch an den Stellen, wo die schwachen Linien erwartet werden, höhere Intensitäten, aber diese Linien werden hier nicht als Übergänge der Art $L_{23}M_{23}$-$M_1^2M_{23}$ gewertet.

## 7.2 Klassifizierung der übrigen $L_{23}M$-$M^3$-Übergänge

Nach der Abschätzung in Kapitel 4 sollten die Übergänge $L_{23}M_{23}$-$M_1M_{23}^2$, $L_{23}M_{23}$-$M_{23}^3$, $L_{23}M_1$-$M_1^2M_{23}$ und $L_{23}M_1$-$M_1M_{23}^2$ im Energiebereich von 170 bis 203 eV zu finden sein. In den gemessenen Spektren beobachtet man dort eine Vielzahl überlappender Linien, die zwei große Gruppen zwischen 175 und 186 eV und zwischen 187 und 200 eV bilden.

In diesen Liniengruppen lassen sich leicht die Linien finden, die zum Anfangszustand $L_{23}M_{23}(^3D_3)$ gehören. Diese Linien zeichnen sich durch eine extrem kleine natürliche Linienbreite von theoretisch 9,4 meV /CC74/, /McG75b/ aus. Die typischen Linienbreiten der übrigen LM-$M^3$-Satelliten liegen zwischen 50 und 150 meV. So konnten zunächst die Linien $L_{23}M_{23}(^3D_3)$-$M_1M_{23}^2(^2D)$, $L_{23}M_{23}(^3D_3)$-$M_{23}^3(^2P)$ und $L_{23}M_{23}(^3D_3)$-$M_{23}^3(^2D)$ identifiziert werden. Anhand der im vorigen Abschnitt diskutierten relativen Energien von Nordgren et.al. /NANS76/ und unter Berücksichtigung der theoretisch zu erwartenden Intensitäten /McG75b/ konnte nach weiteren Linien für dieselben Endzustände gesucht werden. Linien, die zu anderen Endzuständen gehören, konnten unter Benutzung der relativen Energien für die Terme der Endzustände $M_1M_{23}^2(^4P)$, $(^2D)$, $(^2P)$, $(^2S)$ und $M_{23}^3(^4S)$, $(^2D)$, $(^2P)$ aus den Moore-Tabellen /Mo49/ gefunden werden. Es wurden aber nur solche Linien klassifiziert, deren Intensitäten mit den von McGuire /McG75b/ berechneten Werten ungefähr übereinstimmten. Auf diese Weise konnten 19 Linien identifiziert werden.

In Tab. 7.5 sind die gemessenen relativen Energien verglichen mit den Relativenergien, die sich aus den Daten von Nordgren et.al. für die Anfangszustände und den Daten von Moore für die Endzustände ergeben. Es zeigt sich, daß schmale Linien nur um $\pm$10 meV abweichen, während bei starker Überlappung mehrerer Linien Abweichungen von $\pm$30 bis $\pm$70 meV beobachtet werden. Bei einigen Linien ist die Abweichung größer als 100 meV. Das sind meist sehr breite Linien, die von mehreren Übergängen herrühren.

Tab. 7.5 Relative Energien für Übergänge $L_{23}M_{23}$-$M^3_{23}$ und -$M_1M^2_{23}$. Aus optisch gemessenen Energien der Anfangs- und Endzustände nach /NANS76/ und /Mo49/ wurden relative Übergangsenergien berechnet (obere Zahl). Die untere Zahl entspricht der hier gemessenen Energie. Die Energieeichung wurde an den experimentell beobachteten Linien der $^3D_3$-Zerfälle vorgenommen.

| Initial Term / Final Term | Energy [eV] | $M^3_{23}$ | | | $M_1M^2_{23}$ | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | $^4S$ | $^2D$ | $^2P$ | $^4P$ | $^2D$ | $^2P$ | $^2S$ |
| | Energy [eV] | 0.000 | 2.623 | 4.335 | 14.641 | 18.091 | 20.663 | 22.041 |
| $^1P_1$ | -0.295 | | | -4.630<br>-4.62 | | | -20.958<br>-20.92 + | |
| $^3D_3$ | 0.000 | 0.000 | -2.623<br>-2.61 | -4.335<br>-4.33 | | -18.091<br>-18.11 | | |
| $^3D_2$ | 1.049 | | -1.574<br>-1.44 + | -3.286<br>-3.14 ? | -13.592<br>-13.59 + | | -19.614<br>-19.48 + | |
| $^3S_1$ | 1.850 | 1.850<br>1.87 + | -0.773<br>-0.68 ? | | -12.791<br>-12.77 + | | -18.813<br>-18.84 | |
| $^3P_2$ | 2.109 | | | | | | | |
| $^3D_1$ | 2.220 | | -0.403<br>-0.28 ? | | | | | |
| $^3P_0$ | 3.308 | | | | | | | |
| $^3P_1$ | 3.556 | | | | | | | |
| $^1D_2$ | 4.420 | | 1.797<br>1.87 + | | | -13.671<br>-13.59 | | |
| $^1S_0$ | 6.483 | | 3.860<br>3.54 ? | 2.148<br>2.07 + | | | | -15.558<br>-15.24 ? |

\+ Breite Linie im Spektrum

? Klassifikation unsicher

In diesen Fällen, die durch Fragezeichen gekennzeichnet wurden, ist die Klassifizierung unsicher.

Bei der Identifizierung von $L_{23}M_1$-$M^3$-Übergängen kann man sich nicht auf experimentelle Relativenergien für die Anfangszustände stützen. Es gibt bisher nur eine Rechnung /McG75b/ für die Multiplettaufspaltung der Konfiguration $L_{23}M_1$. In dieser Rechnung werden aber, wie schon bei Betrachtung der Konfiguration $L_{23}M_{23}$ erwähnt, Slaterintegrale des neutralen Atoms verwendet. Diese sind stets kleiner als die Slaterintegrale des zweifach ionisierten Atoms. Deshalb ist zu erwarten, daß die von McGuire berechnete Aufspaltung zu klein ist.

Die gute Übereinstimmung der Rechnungen dieser Arbeit mit dem Experiment für die $L_{23}M_{23}$-Multipletts ließ auch eine neue Rechnung für die $L_{23}M_1$-Konfiguration sinnvoll erscheinen. Abb. 7.2 zeigt besonders für die experimentell beobachtbaren Niveaus $^1P_1$ und $^3P_1$ eine starke Abweichung von McGuires Werten. Es wurden hier das Slaterintegral

$$G^1(2p3p) = 1{,}862 \text{ eV}$$

und der Spin-Bahn-Parameter

$$\zeta_{2p} = 1{,}401 \text{ eV}$$

benutzt. Die Aufspaltung wurde wieder in intermediärer Kopplung berechnet.

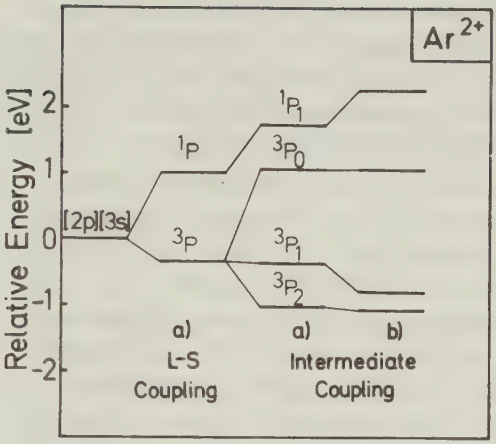
Im Spektrum wurde nun nach Doubletts vom Typ II mit dem hier berechneten $^3P_1$-$^1P_1$-Abstand gesucht. Nach McGuire /McG75b/ müssen diese Linien natürliche Linienbreiten von etwa 150 meV besitzen. Damit sind sie breiter als die Diagrammlinien. Es konnten drei Doubletts gefunden werden, deren Abstand gegeneinander wiederum mit den relativen Energien der Endzustände von Moore übereinstimmt (s. Tab. 7.6). Die $L_{23}M_1(^1P)$-$M_1M_{23}^2(^2P)$-Linie wurde allein auf Grund der bekannten Energien der Endzustände klassifiziert.

Die Intensitäten aller hier klassifizierten Linien werden in Tab. 7.7 mit theoretischen Daten /McG75b/ verglichen. Zum Vergleich wurden nur die Daten aus dem

Tab. 7.6 Relative Energien für Übergänge $L_{23}M_1$-$M_1M_{23}^2$. Aus berechneten Energien der Anfangszustände und optisch gemessenen Energien der Endzustände wurden relative Übergangsenergien berechnet (obere Zahlen). Die unteren Zahlen entsprechen den hier gemessenen Energien. Die Skala für die experimentellen Energien wurde so festgelegt, daß die Abweichungen von den berechneten Energien minimal wurden.

| | | Final Term | $^4P$ | $^2D$ | $^2P$ | $^2S$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Initial Term | Calculated Energy [eV] | Energy[a] [eV] | 14.64 | 18.09 | 20.66 | 22.04 |
| $^3P_1$ | 0.00 | | -14.64<br>-14.67 | -18.09<br>-18.05 | -20.66<br>-20.51 | -22.04<br>-22.01 |
| $^1P_1$ | 2.09 | | -12.55<br>-12.59 | -16.00<br>-15.99 | | -19.95<br>-19.91 |

a)/Mo49/.




a) Diese Arbeit, b)/McG75b/.

Abb. 7.2 Multiplettaufspaltung der Konfiguration $L_{23}M_1$ im Argon

durch $e^-$ angeregten Spektrum herangezogen. Bei Anregung durch $H^+$ und $He^+$ erfolgt eine erhöhte Anregung der $L_{23}M$-Zustände infolge Doppelstoß. Da dieser Prozeß in den theoretischen Daten nicht berücksichtigt ist, kann man die letztgenannten Intensitäten nicht zum Vergleich heranziehen.

In Tab. 7.7 erkennt man, daß die gemessenen Intensitäten oft stark von den berechneten Werten abweichen. Die experimentellen Daten haben aber sehr große Fehler, da die Linien im Spektrum oft nicht hinreichend voneinander getrennt werden können. Deshalb läßt sich nicht sagen, ob die Abweichungen ihre Ursache in den Rechnungen haben. Bei der Gruppe der $L_{23}M_1$-$M_1M_{23}^2$-Übergänge ist jedoch fast immer die berechnete Intensität zu groß. Im Mittel liegen die theoretischen Werte um einen Faktor 2 höher. Der Grund dafür liegt in den zu hohen berechneten Coster-Kronig-Raten (s. Tab. 7.3).

Tab. 7.7 Relative Intensitäten von $L_{23}M\text{-}M^3$-Übergängen. Die erste Zahl ist die nach McGuire /McG75b/ berechnete Intensität, die zweite Zahl die bei Anregung durch 2,5-keV-$e^-$ gemessene Intensität. Die Fehler liegen zwischen 10% und 40%. Bei Doppelklassifikationen wurden die Intensitäten im theoretischen Verhältnis aufgeteilt.

| Initial Term \ Final Term | $M_{23}^3$ $^4S$ | $M_{23}^3$ $^2D$ | $M_{23}^3$ $^2P$ | $M_1M_{23}^2$ $^4P$ | $M_1M_{23}^2$ $^2D$ | $M_1M_{23}^2$ $^2P$ | $M_1M_{23}^2$ $^2S$ | $M_1^2M_{23}$ $^2P$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $L_3M_{23}$ $^1P_1$ | 4 | 14 | 9<br>3? | 2 | 1 | 14<br>56 | 0.3 | 6<br>26 |
| $^3P_2$ | 0 | 143<br>278 | 102<br>131 | 0.1 | 90<br>156 | 1 | 0.01 | 100*<br>100 |
| $^3D_2$ | 21 | 127<br>125 | 58<br>65? | 11<br>43+ | 39 | 15<br>46 | 0 | 12<br>17 |
| $^3S_1$ | 63<br>102° | 104<br>229? | 71 | 32<br>88 | 1 | 43<br>49 | 5 | 9<br>12 |
| $^3P_2$ | 7 | 14 | 9 | 3 | 1 | 4 | 0 | 0.3 |
| $^3D_1$ | 2 | 55<br>1 4? | 38 | 1 | 26 | 17 | 2 | 38<br>59 |
| $^3P_0$ | 21 | 35 | 37 | 11 | 0 | 15 | 5 | 1 |
| $^3P_1$ | 23 | 38 | 26 | 12 | 0.05 | 16 | 0.2 | 1 |
| $^1D_2$ | 5 | 115<br>186° | 41 | 2 | 41<br>162+ | 3 | 0 | 2 |
| $^1S_0$ | 24 | 39<br>47? | 36?<br>131 | 12 | 0 | 16 | 127<br>200? | 5 |
| $L_{23}M_1$ $^3P_2$ | | | | 3 | 3 | 0.3 | 1 | 1 |
| $^3P_1$ | | | | 233<br>139 | 395<br>128 | 235<br>71§ | 108<br>80 | 103 |
| $^3P_0$ | | | | 1 | 1 | 0.06 | 0.1 | 0.2 |
| $^1P_1$ | | | | 237<br>104 | 510<br>318 | 369 | 140<br>119 | 112 |

* Normalized arbitrarily

°, +, § Intensitäten der überlappenden Linien im theoretischen Verhältnis aufgeteilt,

? Klassifikation unsicher.

Die höheren Intensitäten der LM-Satellitenlinien nach Anregung durch die langsameren Projektile $H^+$ und $He^+$ lassen sich nur durch zusätzliche direkte Ionisation der beiden Elektronen des $L_{23}M$-Zustandes erklären. Um diese direkte Ionisation zu untersuchen, müßte man den Anteil der Anregung von $L_{23}M$-Zuständen abziehen, der durch Coster-Kronig-Übergänge als Folge der Einfachionisation der $L_1$-Schale entsteht. Dies kann man tun, indem man von den Intensitäten nach $H^+$- und $He^+$-Anregung die Intensitäten des durch $e^-$ angeregten Spektrums subtrahiert, nachdem man die Einfachionisation beider Spektren gleichgesetzt hat. Das kann man z.B. durch Gleichsetzen der $L_{2,3}$-$M_{23}^2$-Intensitäten erreichen. Der Anteil der Intensität $I_2$, der dann auf primäre Zweifachionisation zurückzuführen ist, berechnet sich dann wie folgt:

$$I_2(i\text{-}f) = I(i\text{-}f) - I_e\text{-}(i\text{-}f)\cdot I(L_{2,3}\text{-}M_{23}^2)/I_e\text{-}(L_{2,3}\text{-}M_{23}^2)$$

Hier bedeuten:

| | |
|---|---|
| $I(i\text{-}f)$ | die für den Übergang i-f gemessene Intensität bei Anregung durch $H^+$ oder $He^+$ bestimmter Energie, |
| $I(L_{2,3}\text{-}M_{23}^2)$ | die für die gleiche Anregung gemessene Intensität der Diagrammlinien $L_{2,3}$-$M_{23}^2$, |
| $I_e\text{-}(i\text{-}f)$ | die für den betrachteten Übergang i-f gemessene Intensität bei Anregung durch 2,5-keV-Elektronen und |
| $I_e\text{-}(L_{2,3}\text{-}M_{23}^2)$ | die Intensität der Diagrammlinien $L_{2,3}$-$M_{23}^2$ nach Anregung durch 2,5-keV-Elektronen. |

Man kann aus $I_2$ nun die Wahrscheinlichkeit für die Bevölkerung des Anfangszustandes berechnen unter Verwendung der theoretischen Übergangswahrscheinlichkeiten:

$$P_i = I_2(i\text{-}f)\cdot\frac{\sum_{f'} w_{if'}}{w_{if}}$$

Jedoch wurde weiter oben gezeigt, daß die gemessenen Intensitäten oft stark von den berechneten Intensitäten abweichen. Das ist teilweise erklärbar durch große Fehler der experimentellen Daten, läßt andererseits aber

auch die Vermutung zu, daß die berechneten Übergangswahrscheinlichkeiten nicht stimmen. Aus diesen Gründen lassen sich hier keine relevanten Daten für die $P_i$ gewinnen, mit denen sich evtl. die statistische Anregung der $L_{23}M$-Zustände prüfen ließe.

## 6. Untersuchung der Satelliten des Typs III

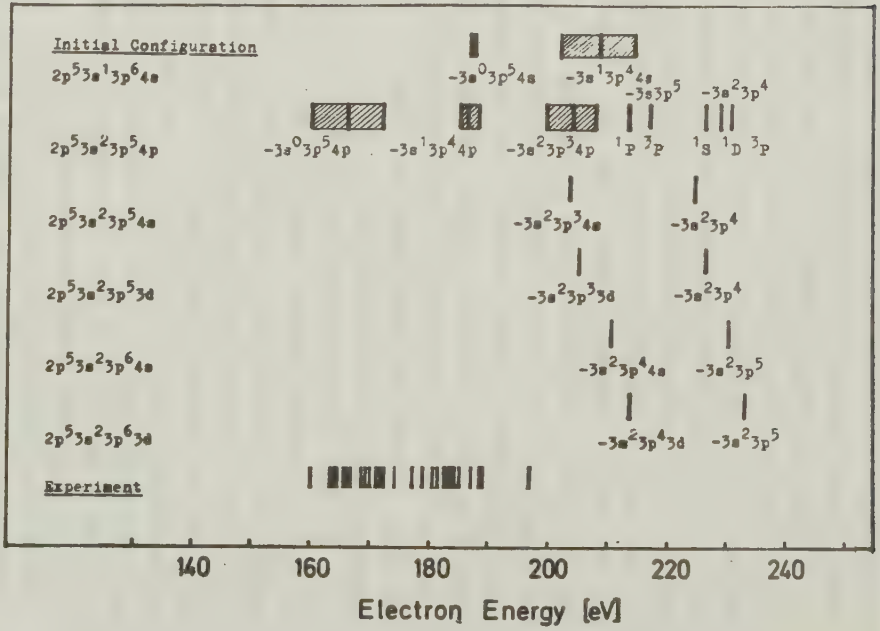
Die auf die Intensität der $L_{23}M_{23}(^3D_3)$-$M_1^2M_{23}(^2P)$-Linie normierten Intensitäten der Linien des Typs III zeigen keine Variation mit der Projektilgeschwindigkeit für Anregung durch Protonen und Elektronen. Auch bei $He^+$-Anregung ist keine ausgeprägte Abhängigkeit von der Projektilgeschwindigkeit beobachtbar. Jedoch liegen die Intensitäten im letzteren Falle insgesamt um einen Faktor 2 bis 4 höher als bei Anregung durch Protonen und Elektronen. Das deutet auf einen Anregungsmechanismus hin, der entweder stark von der Ladung des Projektilkerns oder von der Struktur des Projektils abhängt. Im Fall des $He^+$ besteht zum Beispiel die Möglichkeit, daß das gebundene Elektron des $He^+$ vom Targetatom eingefangen oder ausgetauscht wird. Dadurch können Zustände angeregt werden, die das Umklappen des Spins eines Elektrons erfordern. Solche Zustände sind zwar auf Grund der meist vorliegenden intermediären Kopplung bei mehreren Leerstellen nicht mehr verboten für $H^+$ und $e^-$-Anregung, aber doch weniger wahrscheinlich.

Es könnte sich dabei auch um einen Prozeß handeln, der mit dem 'shake-up'-Prozeß konkurriert. Der 'shake-up' Prozeß führt während der Ionisation der L-Schale zu einer Anregung eines Elektrons aus der M-Schale. Das Elektron aus der M-Schale wird durch die plötzliche Änderung der Kernabschirmung, die durch die Ionisation der L-Schale hervorgerufen wird, bei der Relaxation der Orbitale in ein freies Orbital mit gleichem Bahndrehimpuls angehoben. Dies ist also eine Monopol-Anregung.

Dieselben Zustände können bei $He^+$-Anregung zudem noch durch Zweifach-Ionisation und Einfang eines Projektilelektrons erzeugt werden. Diesen zusätzlichen Anregungsmechanismus gibt es bei Anregung durch $H^+$ und $e^-$ nicht. Außerdem werden durch $He^+$ auch die für Monopolanregung verbotenen Zustände angeregt.

Es wäre auch möglich, daß die unterschiedliche Wahrscheinlichkeit für Elektroneneinfang durch $He^+$ und $H^+$ eine be-

Abb. 8.1 Gemessene Lagen der Linien des Typs III und berechnete Energien von Übergängen, die diesen Linien entsprechen könnten. Für die ersten beiden Reihen wurde die Multiplettaufspaltung in LS-Kopplung berechnet und der Bereich, in dem die Terme liegen, schraffiert angedeutet. Die Anfangszustände sind links aufgeführt, während die Endzustände bzw. -konfigurationen unter den Linien angegeben sind.



sonders starke Anregung bestimmter Zustände durch $He^+$ bewirkt. In diesem Fall müßten die betreffenden Linien aber bei $e^-$-Anregung verschwinden. Außerdem sind die Wirkungsquerschnitte für Elektroneneinfang bei $H^+$ höher als bei $He^+$ /SB56/, /BS58/, /ACM56/, /HSM66/. Die Möglichkeit des Elektroneneinfangs scheidet damit für die Anregung der Anfangszustände der Satelliten des Typs III aus.

Um abzuschätzen, ob Übergänge der Art

$$2p^5 3s^2 3p^5 4p - 2p^6 3s^0 3p^5 4p$$

oder $$2p^5 3s^2 3p^5 4p - 2p^6 3s^1 3p^5$$

mit den Linien des Typs III zu identifizieren sind, wurden Rechnungen durchgeführt, deren Ergebnisse in Abb. 8.1 eingetragen sind. Es wurde auch die Aufspaltung der Multipletts der Endzustände in LS-Kopplung berechnet. Die Aufspaltung der bei Monopolanregung erlaubten Terme des Anfangszustandes liegt bei 2 eV und wurde vernachlässigt gegenüber der Aufspaltung der Endzustände.

Für die Konfiguration $3s^2 3p^3 4p$ konnte die berechnete Aufspaltung mit spektroskopischen Daten /Mo49/ verglichen werden (s. Abb. 6.2). Es zeigte sich gute Übereinstimmung bei einer etwas zu großen berechneten Gesamtaufspaltung. Außerdem konnte gezeigt werden, daß hier die Spin-Bahn-Wechselwirkung keinen großen Einfluß hat. Damit sind die in der Abb. 8.1 angegebenen Gesamtaufspaltungen gute Abschätzungen für die Gebiete, in denen die Satelliten zu suchen sind. Es ist allerdings zu berücksichtigen, daß die absoluten Energien auf einige eV ungenau sind.

Es wurden schon früher Übergänge berechnet, deren Anfangszustände nicht durch Monopol-Anregung oder "shake-up" bevölkert werden können wie $2p^5 3s^2 3p^5 3d - 2p^6 3s^2 3p^3 3d$/SSZ74/. Diese Übergänge liegen fast an der gleichen Stelle wie die nach Monopol-Anregung möglichen Linien, da die Bindungsenergien der äußeren Elektronen sich nur um Beträge in der Größenordnung von eV unterscheiden. Es wurden auch Übergänge berechnet, bei denen das Elektron in der äußersten Schale nicht "spectator" bleibt, sondern am Übergang beteiligt ist. Die Energien dieser Linien sind jedoch

sämtlich größer als 200 eV. Damit liegen diese Satelliten zu hoch für die Linien des Typs III, die bis auf eine Linie bei 197 eV sämtlich zwischen 160 eV und 190 eV liegen.

In Abb. 8.1 erkennt man, daß sich die Satelliten des Typs III in den Gebieten häufen, in denen laut Rechnung die Übergänge

$$2p^5 3s^2 3p^5 4p - 2p^6 3s^0 3p^5 4p$$

und

$$2p^5 3s^2 3p^5 4p - 2p^6 3s^1 3p^4 4p$$

liegen. Ordnet man diesen Übergängen die Satelliten vom Typ III zu, so sind aber auch in dem für die Übergänge

$$2p^5 3s^2 3p^5 4p - 2p^6 3s^2 3p^3 4p$$

berechneten Gebiet solche Satelliten zu erwarten. Das ist der Bereich, in dem die Diagrammlinien $L_{2,3}$-$M_{23}^2$ liegen. Gerade hier wurde vor dem Fit der Spektren eine quasi-kontinuierliche Verteilung abgezogen. Es wurde jedoch beobachtet, daß diese Verteilung bei $He^+$-Anregung nicht höher, sondern sogar niedriger ist, als bei $H^+$- und $e^-$-Anregung. Daher können dies keine Satelliten des Typs III sein. Dieser Sachverhalt widerspricht der obigen versuchsweisen Zuordnung.

Es wäre deshalb interessant, weitere Experimente durchzuführen, bei denen man die Satelliten des Typs III evtl. noch stärker anregt. Man sollte als Projektile $He^{++}$ oder schwerere Ionen wie etwa $C^+$ oder $Ne^+$ verwenden. Auch wäre an eine Erweiterung des Geschwindigkeitsbereichs zu niedrigeren Projektilgeschwindigkeiten hin für $H^+$ und $He^+$ zu denken.

## 9. $L_{23}M_{23}^2$-$M_1^2M_{23}^2$-Satellitenübergänge

In den gemessenen Spektren zeigt sich noch eine weitere Liniengruppe, die schon im 4. Kapitel mit Hilfe berechneter mittlerer Übergangsenergien als $L_{23}M_{23}^2$-$M_1^2M_{23}^2$-Übergänge klassifiziert werden konnten. Diese Liniengruppe liegt am niederenergetischen Ende des gemessenen Spektrums zwischen 145 und 156 eV, ihre Energie ist kleiner als die aller $L_{23}M$-$M^3$-Übergänge. Somit ist die $L_{23}M_{23}^2$-$M_1^2M_{23}^2$-Gruppe gut isoliert und Überlappung mit anderen Satelliten wäre nur für $L_{23}M^3$-$M^5$-Übergänge denkbar. Die Intensität dieser Linien wird aber wegen der geringen Wahrscheinlichkeit für die Anregung des vierfach ionisierten Anfangszustandes als vernachlässigbar angenommen.

In Abb. 9.1 sind die gemessenen $L_{23}M_{23}^2$-$M_1^2M_{23}^2$-Spektren nach Abzug des kontinuierlichen Spektrums dargestellt. Es wurden 22 Linien zwischen 146 eV und 156 eV beobachtet. Durch Fit wurden Energielagen bestimmt, die zur Identifikation vieler Linien führten. Zuerst wurde versucht, die Linien nach der Multiplettaufspaltung des Endzustandes zu sortieren. Die Konfiguration des Endzustandes $M_1^2M_{23}^2$ besitzt die Multiplett-Terme $^1S_0$, $^1D_2$ und $^3P_{0,1,2}$. In LS-Kopplung ergibt sich der relative Abstand der Terme zu

$$\frac{E(^1S) - E(^1D)}{E(^1D) - E(^3P)} = \frac{3}{2} = 1{,}5$$

(s. /CS70/,S.193). Berücksichtigt man noch die schwache Spin-Bahn-Wechselwirkung, so erhält man die in Tab. 9.1 angegebenen Energien. Die Aufspaltung des $^3P$-Terms beträgt 230 meV und führt im Spektrum zu einer breiten Linie. Diese Linie läßt sich im Spektrum nicht so gut lokalisieren wie die Übergänge zu den Singlett-Zuständen. Deshalb erwartet man für die $^3P$-Energien größere Fehler. Es wurden nun mit einem einfachen Computer-Programm alle gemessenen Energien nach Tripeln mit dem entsprechenden Verhältnis der Abstände abgesucht. Dabei wurden mehrere Tripel von Energiewerten gefunden, die noch zwei verschieden große Aufspaltungen zuließen

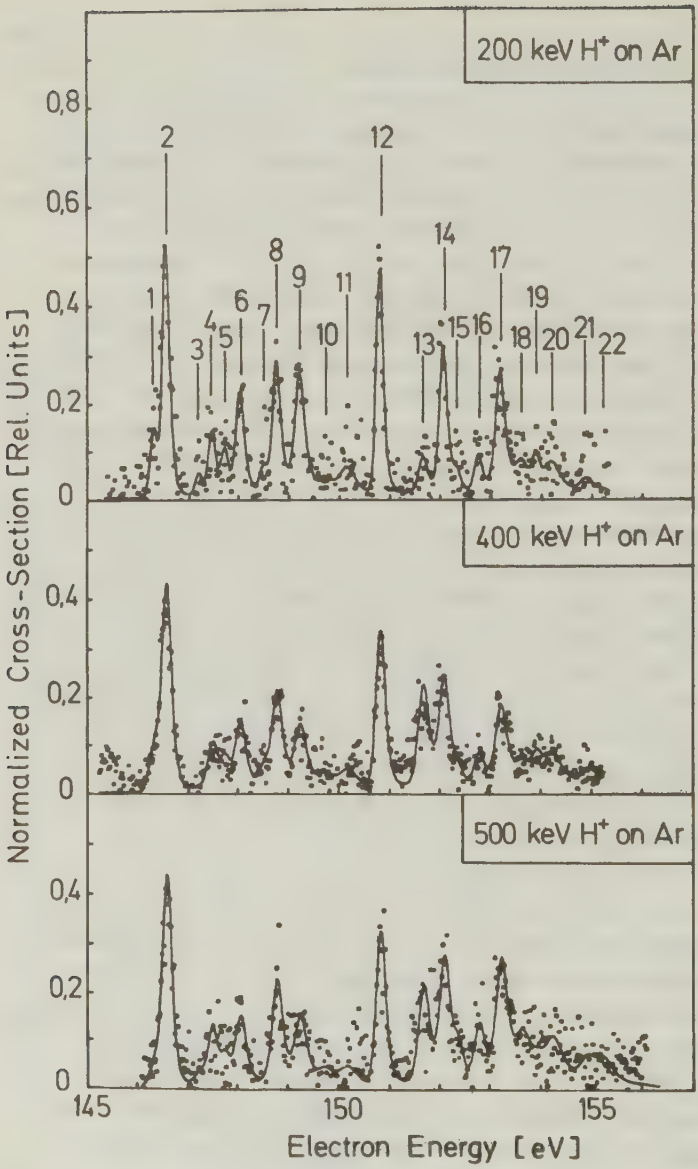



Abb. 9.1 Die $L_{23}M_{23}^2$-$M_1^2M_{23}^2$-Satelliten. Die durchgezogenen Kurven zeigen das Ergebnis des Fits. Die Normierung der Intensitäten auf gleiche Intensität der $L_{23}M_{23}(^3D_3)$-$M_1^2M_{23}(^2P)$-Linie ist dieselbe wie in Abb. 4.2a,b.

Tab. 9.1 Vergleich berechneter Termabstände der Konfiguration $M_1^2 M_{23}^2$ mit gemessenen Linienabständen. Die gemessenen Linien wurden so ausgewählt, daß sie jeweils ein Triplett mit einem Verhältnis der relativen Abstände bilden, das mit dem unten angegebenen theoretischen Aufspaltungsverhältnis verträglich ist. Man sieht, daß vom Spektrum her zwei Aufspaltungen möglich sind. Die experimentellen relativen Energien sind Mittelwerte mit Fehlern von±0,05 eV.

| Term | Theory | | Classification | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | 1. Possibility | | | | | 2. Possibility | | | |
| | Rel. Energy [eV] | Energy Differences [eV] | Line Numbers and Energy Differences [eV] | | | | Rel. Energy [eV] | Line Numbers and Energy Diff. [eV] | | | Rel. Energy [eV] |
| $^1S_0$ | -4.535 | | 2 | 5 | 9 | 11 | -4.06 | 2 | 5 | 6 | -5.72 |
| | | 3.37 | 3.14 | 3.09 | 3.13 | 3.05 | | 4.25 | 4.35 | 4.31 | |
| $^1D_2$ | -1.169 | | 10 | 12 | 15 | 17 | -0.96 | 12 | 14 | 15 | -1.42 |
| | | 2.25 | 1.96 | 1.95 | 1.87 | 2.02 | | 2.81 | 2.82 | 2.88 | |
| $^3P_0$ | 0.931 | | | | | | | | | | |
| $^3P_1$ | 0.999 | | 13 | 16 | 20 | 22 | 0.99 | 18 | 21 | 22 | 1.42 |
| $^3P_2$ | 1.160 | | | | | | | | | | |
| $\frac{E(^1S)-E(^1D)}{E(^1D)-E(^3P)}$ | 1.5 | | | | | | 1.39 | | | | 1.51 |

(s. Tab. 9.1). Die Tripel, die zu der kleineren Aufspaltung gehören, zeigen sehr gute Übereinstimmung mit den berechneten relativen Energien. Andererseits stimmt das oben erwähnte Verhältnis der Energieabstände für das Tripel mit der größeren Aufspaltung mit 1,51 sehr gut mit der Theorie überein, während sich für den anderen Fall 1,59 ergibt. Innerhalb der Fehlergrenzen ist jedoch auch dieser Wert mit der Rechnung verträglich.

Die Berechnung der Multiplettaufspaltung für die im Anfangszustand möglichen Terme der Konfiguration $L_{23}M_{23}^2$ erfordert einen größeren Aufwand. Man muß zuerst dafür sorgen, daß die Rechnung nicht zum $Ar^{3+}$ Grundzustand $M_{23}^3$ hin konvergiert. Nur im letzteren Falle besitzt nämlich die Energie für die meisten Terme ein echtes Minimum. Man kann aber für die Konfiguration $L_{23}M_{23}^2$ einen Term berechnen, den es für die Konfiguration $M_{23}^3$ nicht gibt. Dann ist der $Ar^{3+}$-Grundzustand nicht mehr der niedrigste Zustand mit der gleichen Symmetrie, und die Rechnung ergibt realistische Werte für die Slaterintegrale /FF77/. Mit diesen Integralen läßt sich dann die Multiplettaufspaltung in LS-Kopplung berechnen (s. Abb. 9.2).

Nun ist aber auch die Spin-Bahn-Wechselwirkung von gleicher Größenordnung wie die elektrostatische Aufspaltung. Es wurde deshalb die Spin-Bahn-Matrix berechnet und zusammen mit der elektrostatischen Wechselwirkung diagonalisiert. Die Spin-Bahn-Matrix für $L_{23}M_{23}^2$ erhält man durch Vorzeichenumkehr aus der Matrix für $2p3p^2$. Eine Formel für die Spin-Bahn-Matrix von Konfigurationen der Art $l^n l'$ findet sich in /Wy65/. Der Ausdruck sei hier wiedergegeben, da sich im Original ein Druckfehler findet (s. /Ch72/):

$$\langle n\,\ell^N(L_i S_i), n'\ell'; SLJM/H_{so}/n\ell^N(L_i' S_i'), n'\ell'; S'L'JM\rangle =$$

$$= (-1)^{S'+L+J+S_i+L_i+\ell'+\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} L & L' & 1 \\ S' & S & J \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \sqrt{(2S+1)(2L+1)(2S'+1)(2L'+1)} \times$$

$$\times\left[\sqrt{\ell(\ell+1)(2\ell+1)}\,(-1)^{L'+S'}\begin{Bmatrix} S & S' & 1 \\ S_1' & S_1 & \frac{1}{2}\end{Bmatrix}\times\right.$$

$$\times\begin{Bmatrix} L & L' & 1 \\ L_1' & L_1 & \ell'\end{Bmatrix}\times\left(\ell^N(L_1S_1)\|V^{(11)}\|\ell^N(L_1'S_1')\right)\cdot\zeta_{n\ell}+$$

$$+(-1)^{L+S}\sqrt{\ell'(\ell'+1)(2\ell'+1)}\cdot\delta(L_1S_1,L_1'S_1')\times$$

$$\left.\times\begin{Bmatrix} S & S' & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S_1\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} L & L' & 1 \\ \ell' & \ell & L_1\end{Bmatrix}\left(s=\tfrac{1}{2},\ell'\|v^{(11)}\|s=\tfrac{1}{2},\ell'\right)\zeta_{n\ell'}\right]$$

mit: $\left(\ell^N(L_1S_1)\|V^{(11)}\|\ell^N(L_1'S_1')\right)=$

$$=N\cdot\sqrt{s(s+1)(2s+1)(2S_1+1)(2L_1+1)(2S_1'+1)(2L_1'+1)}\times$$

$$\times\sum_{\bar{\gamma}}'(\gamma_1\{|\bar{\gamma})(\bar{\gamma}\|\gamma_1)\begin{Bmatrix} S_1 & S_1' & 1 \\ s & s & \bar{S}\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} L_1 & L_1' & 1 \\ \ell & \ell & \bar{L}\end{Bmatrix}\times$$

$$\times(-1)^{S+\bar{L}+S_1+L_1+\ell+s}$$

und: $(s,\ell'\|v'^{(11)}\|s,\ell')=(s\|s\|s)=\sqrt{\frac{3}{2}}$

Hierbei sind die $(\gamma_1\{|\bar{\gamma})$ die "coefficients of fractional parentage" (c.f.p.). Für die $p^2$ Konfiguration gibt es nur einen Zwischenterm, zu dem man das zweite p-Elektron koppelt, nämlich den $p(^2P)$-Term Daraus folgt, daß sich die Summe über die Zwischenterme auf einen Summanden reduziert, der stets gleich eins ist /Sob 72/. Die letzten beiden **Formeln**, sowie die Werte der c.f.p. sind in /Wy65/ und /Sob72/ zu finden. Die in /Sob72/ angegebenen Matrixelemente für $V^{(11)}$ sind teilweise falsch und wurden **neu berechnet, Es wurde ein Programm zur Berechnung der Spin-Bahn-Matrix** $\langle\,|H_{so}|\,\rangle$ **geschrieben. Unter** Berücksichtigung der Spin-Bahn-Matrixelemente wurde dann

die Energiematrix diagonalisiert. In Abb. 9.2 sind die so ermittelten Energien in intermediärer Kopplung eingezeichnet. Diese Multiplettaufspaltung wurde der Identifikation einzelner Linien im Spektrum zugrundegelegt. Die Terme wurden hier wegen der starken Mischung sowohl durch nichtdiagonale Elemente in LS-Kopplung als auch durch starke Spin-Bahn-Wechselwirkung entsprechend der in Kap. 1 erläuterten Notation nach Gesamtdrehimpuls und Termenergie bezeichnet. Bei der Notation der Terme in LS-Kopplung ist zu bemerken, daß zuerst die beiden 3p-Leerstellen gekoppelt wurden und anschließend die 2p-Leerstelle hinzugefügt wurde, also z.B.:

$$( (3p^4)^1D , (2p^5)^2P )\ ^2F \quad \hat{=} \quad (^1D)^2F$$

Zur Identifikation der im Spektrum sichtbaren Linien reichten die berechneten relativen Energielagen nicht aus. Es mußte eine Annahme über die relativen Intensitäten gemacht werden. McGuire hat kürzlich /McG77/ für die Übergangswahrscheinlichkeiten für Augerübergänge der Form

$$(2p)^5(3p)^m(nl)^{4l+2} \ - \ (3p)^m(nl)^{4l},$$

hier mit: $nl = 3s$,

in intermediärer Kopplung für die Anfangszustände die einfache Formel abgeleitet:

$$\frac{W_{Au}(i,J)}{2\pi} = \frac{1}{9} D(p,p) = \frac{1}{9} D(1,1)$$

mit: J Gesamtdrehimpuls des Anfangszustands

i zusätzliche Kennzeichnung des Anfangszustandes nach der Energie

$$D(p,p) = 1/3 \int_0^\infty\int_0^\infty R_{2p}(r_1)\cdot R_{\epsilon p}(r_2)\cdot \frac{r_<}{r_>^2}\cdot R_{3s}(r_1)\cdot R_{3s}(r_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2$$

wobei $R_{\epsilon p}$ die Radialfunktion für das Kontinuumsloch im Anfangszustand ist und $r_< = \mathrm{Min}(r_1,r_2)$, $r_> = \mathrm{Max}(r_1,r_2)$.

Diese Formel besagt, daß $W_{Au}$ unabhängig ist vom speziellen Term des Anfangs- und Endzustandes. Das bedeutet nicht, daß die Intensitäten aller $L_{23}M_{23}^2$-$M_1^2M_{23}^2$-Übergänge gleich

sind. Es gibt nämlich noch konkurrierende Zerfälle der Art $L_{23}M_{23}^2-M_1M_{23}^3$ und $L_{23}M_{23}^2-M_{23}^4$ (s. Abb. 4.1), für die die Übergangswahrscheinlichkeiten von den Termen des Anfangs- und Endzustands abhängen. Jedoch folgt aus der obigen Formel, daß jeweils die Intensitäten für Übergänge von einem Term des Anfangszustandes in die drei Terme $M_1^2M_{23}^2(^1S)$, $(^1D)$ und $(^3P)$ gleich groß sind. Das gilt unter der Annahme von LS-Kopplung für die Endzustände, unter der die obige Formel abgeleitet wurde /McG77/. Da der $^3P$-Term etwas nach J aufspaltet, verteilt sich die Intensität in die drei Komponenten $^3P_0$, $^3P_1$ und $^3P_2$. Man sollte also vom Zerfall eines jeden Terms der Konfiguration $L_{23}M_{23}^2$ zwei gleich große Linien und eine breitere aber in der Höhe dreimal kleinere Linie mit den oben angegeben Energieabständen erwarten.

Um theoretische Intensitäten zu erhalten, muß man die Bevölkerungswahrscheinlichkeiten $P_{J_i}$ der Anfangszustände kennen. Geht man davon aus, daß die $L_{23}M_{23}^2$-Zustände durch direkten Stoß erzeugt werden, so kann man statistische Bevölkerung annehmen: $P_{J_i} \propto 2 \cdot J_i + 1$ .
Daraus folgt, daß die intensivsten Linien zu Anfangszuständen mit J=7/2 gehören sollten. Eine solche Linie ist die zweite Linie im berechneten Spektrum, die dem Übergang 7/2b-$^1$S entspricht. Sie ist auch die zweite Linie und zudem eine sehr intensive Linie im gemessenen Spektrum. Diese Linie wurde zuerst identifiziert und bildet den Ausgangspunkt jeder weiteren Klassifikation.

Richtet man sich bei der Linienklassifikation nach den Intensitäten, so muß man die Linie 12, die etwa die gleiche Intensität wie die Linie 2 hat, dem Übergang 7/2 b - $^1$D zuordnen. Das spricht also für die große Multiplett-Aufspaltung des Endzustandes. Folglich ist dann die kleine breite Linie 18 der Übergang 7/2b-$^3$P. Diese Linie hat zwar eine zu kleine Intensität, jedoch ist auf der hochenergetischen Seite des $L_{23}M_{23}^2-M_1^2M_{23}^2$-Spektrums die Überlagerung der Linien zu stark, um noch relevante Daten für Intensitäten zu erhalten.
Die übrigen Linien wurden nun wie in Abb. 9.2 gezeigt nach der berechneten Multiplett-Aufspaltung des Anfangs-

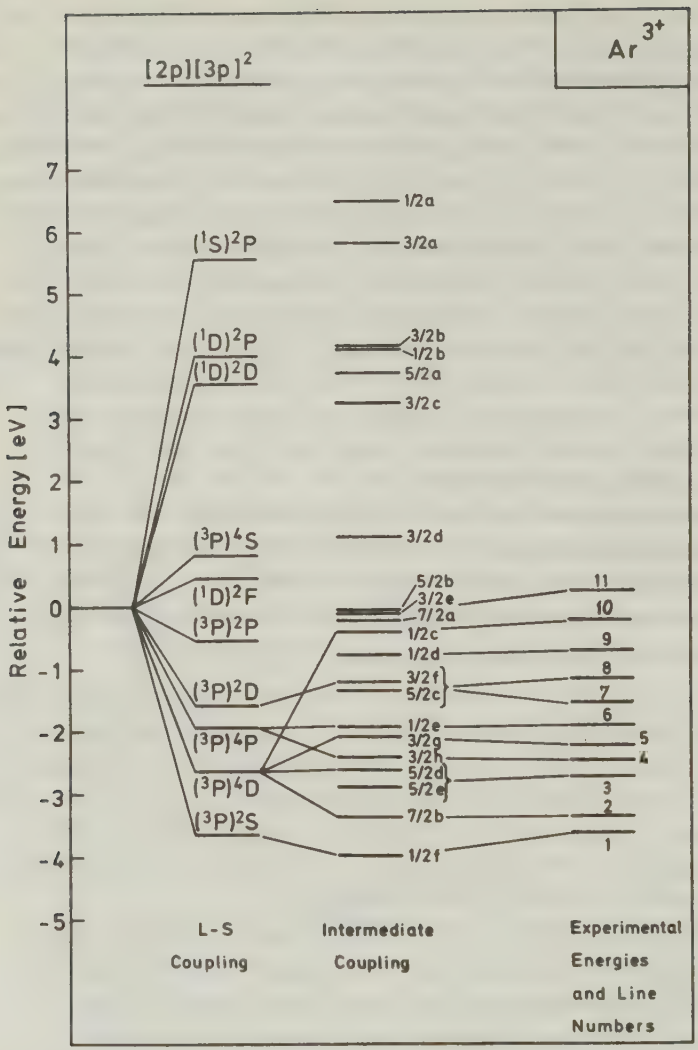



Abb. 9.2 Berechnete und gemessene Energien für die Konfiguration $L_{23}M_{23}^2$. Die experimentellen Werte wurden nach Identifikation der Linie 2 mit dem Term 7/2 b angepaßt.

zustandes klassifiziert. Die beobachteten Linienabstände stimmen nicht genau mit der berechneten Aufspaltung überein. Das bedingt noch Unsicherheiten in der Klassifikation. Es wäre deshalb wünschenswert, theoretische Daten für die Intensitäten dieser Linien als zusätzliches Klassifikationsmerkmal zu haben. Die hier vorgenommene Klassifikation ist in Tab. 9.2 angegeben. Bei einigen Linien konnte nicht entschieden werden, zu welchen der im berechneten Termschema eng benachbarten Niveaus sie gehören. In diesen Fällen wurden mehrere Niveaus aufgeführt.

Die in Tab. 9.2 angegebenen Intensitäten setzen statistische Bevölkerung der Anfangszustände voraus und vernachlässigen alle konkurrierenden Zerfälle. Dann wäre nämlich $P_{J_i} \propto 2J_i+1$ und $W_{Au}$ unabhängig von der Termstruktur und damit $\sum_f W_{Au}^{i\to f}$ vom Anfangszustand unabhängig. Es würde folgen, daß $I_{if} \propto 2J_1+1$. Die experimentellen Daten zeigen aber klar, daß diese Annahmen falsch sind.

Es gibt einen Hinweis für konkurrierende Zerfälle, denn die beobachteten Linien haben sehr unterschiedliche natürlich Linienbreiten. Das bedeutet, daß $\sum_f W_{Au}^{i\to f}$ nicht konstant ist. Da aber die Übergangswahrscheinlichkeiten für $L_{23}M_{23}^2-M_1^2M_{23}^2$-Übergänge immer gleich groß sind, kann das nur daher kommen, daß verschieden große Beiträge von konkurrierenden Zerfällen $L_{23}M_{23}^2-M_1M_{23}^3$ und $L_{23}M_{23}^2-M_{23}^4$ zu $\sum_f W_{Au}^{i\to f}$ hinzukommen. Es sind auch optische Zerfälle möglich, jedoch sind diese Übergänge etwa um einen Faktor 100 unwahrscheinlicher anzunehmen /Me70/.

Eine Untersuchung auf statistische Anregung ist nur möglich, wenn theoretische Daten auch für die Übergangswahrscheinlichkeiten der konkurrierenden Zerfälle bekannt sind. Jedoch wurde von McGuire /McG77/ angenommen, daß die hier betrachteten Anfangszustände nicht durch direkten Stoß, sondern über Konfigurationswechselwirkung mit einfach- oder zweifach-ionisierten Zuständen und anschließenden Coster-Kronig-Übergängen bevölkert werden. In diesen Fällen ist starke Abweichung von der statistischen Anregung zu erwarten.

Tab. 9.2 Klassifikation der $L_{23}M_{23}^2$-$M_1^2M_{23}^2$-Übergänge. Die gemessenen und berechneten Energien wurden für die Endzustandsterme $^1S$, $^1D$ und $^3P$ jeweils auf die Zerfälle des 7/2b-Zustands bezogen. Die experimentellen Intensitäten sind für intensive Linien ( I≥30 rel. Einh. ) auf etwa 5 rel. Einh. genau. Die theoretischen Werte setzen statistische Anregung voraus und vernachlässigen konkurrierende Zerfälle.

| Line Number | Assignment | Relative Energies [eV] for Series: $^1S$ | $^1D$ | $^3P$ | Calculated | Intensities [Rel. Units] Expt. | Theory |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1/2 f - $^1S$ | -0.25 | | | -0.62 | 22 | 25 |
| 2 | 7/2 b - $^1S$ | 0.00* | | | 0.00* | 100* | 100* |
| 3 | 5/2 e - $^1S$ | 0.65 | | | 0.46 | 6 | 75 |
| | 5/2 d - $^1S$ | | | | 0.76 | | 75 |
| 4 | 3/2 h - $^1S$ | 0.91 | | | 0.95 | 26 | 50 |
| 5 | 3/2 g - $^1S$ | 1.16 | | | 1.28 | 15 | 50 |
| 6 | 1/2 e - $^1S$ | 1.47 | | | 1.43 | 44 | 25 |
| 7 | 5/2 c - $^1S$ | 1.93 | | | 2.03 | 7 | 75 |
| | 3/2 f - $^1S$ | | | | 2.16 | | 50 |
| 8 | 5/2 c - $^1S$ | 2.19 | | | 2.03 | 59 | 75 |
| | 3/2 f - $^1S$ | | | | 2.16 | | 50 |
| 9 | 1/2 d - $^1S$ | 2.65 | | | 2.59 | 54 | 25 |
| 10 | 1/2 c - $^1S$ | 3.14 | | | 2.97 | 12 | 25 |
| 11 | 3/2 e - $^1S$ | 3.59 | | | 3.29 | 25 | 50 |
| | 5/2 b - $^1S$ | | | | 3.31 | | 75 |
| 12 | 7/2 b - $^1D$ | | 0.00* | | 0.00* | 79 | 100 |
| 13 | 3/2 h - $^1D$ | | 0.85 | | 0.95 | 49 | 50 |
| 14 | 3/2 g - $^1D$ | | 1.26 | | 1.28 | 67 | 50 |
| 15 | 1/2 e - $^1D$ | | 1.53 | | 1.43 | 10 | 25 |
| 16 | 5/2 c - $^1D$ | | 1.95 | | 2.03 | 21 | 75 |
| | 3/2 f - $^1D$ | | | | 2.16 | | 50 |
| 18 | 7/2 b - $^3P$ | | | 0.00* | 0.00* | 30 | 100 |
| 19 | 1/2 c - $^1D$ | | 3.09 | | 2.97 | 9 | 25 |
| 21 | 3/2 g - $^3P$ | | | 1.27 | 1.28 | 17 | 50 |
| 22 | 1/2 e - $^3P$ | | | 1.60 | 1.43 | 14 | 25 |

*Normalized arbitrarily

Es wäre im Prinzip möglich, daß die Abweichungen der experimentellen Intensitäten von den theoretisch erwarteten Werten durch Winkelabhängigkeiten verursacht werden. Winkelabhängigkeiten sollten für Augerlinien beobachtbar sein, sofern für die Leerstelle in der inneren Schale gilt $J>1/2$ /CM74a/. Es könnten dann die über alle Winkel integrierten Intensitäten wieder mit der Theorie übereinstimmen. Um jedoch die beobachteten Abweichungen zu verursachen, müßten das sehr ausgeprägte Winkelabhängigkeiten sein, die in dieser Stärke noch nicht bekannt sind /CM74b/. Es konnten in diesem Teil des Spektrums leider keine brauchbaren Messungen bei verschiedenen Winkeln vorgenommen werden, da das wesentlich höhere kontinuierliche Spektrum bei Winkeln kleiner als $120^{\circ}$ die Strukturen zu stark verschmiert.

## Schlußfolgerungen

Bei den Diagrammlinien $L_{2,3}$-$M^2$ wurde eine Neuklassifizierung der $L_{2,3}$-$M_1^2$-Linien vorgenommen auf Grund einer Rechnung, die die Konfigurationswechselwirkung berücksichtigte. Es sind aber noch einige andere $Ar^{2+}$-Terme in der Nähe des $M_1^2$-Terms mit Berücksichtigung der Konfigurationswechselwirkung zu berechnen. Vor allem wäre es auch interessant zu untersuchen, ob die relativen Energien der Terme der Konfiguration $M_1M_{23}$ sich in Konfigurationswechselwirkung besser berechnen lassen.

Bei den $L_{23}M_{23}$-$M^3$-Übergängen ist die Reihenfolge der Terme $^3D_1$ und $^3P_2$ noch unsicher. Bisher zeigten die Rechnungen, daß der Term $^3P_2$ höher liegt als der $^3D_1$-Term. Die Multikonfigurationsrechnung von Froese-Fischer deutete jedoch eine Inversion an. In den Spektren dieser Arbeit ist nur der Term $^3D_1$ zu beobachten, weil er zu intensiveren Linien führt. Seine Relativenergie stimmt zwar beim Vergleich mit optischen Messungen mit der Energie des dort noch als $^3D_1$ klassifizierten niedrigeren Terms überein, könnte aber auch mit der Energie des höheren Terms übereinstimmen, der nach Froese-Fischers Rechnung dem $^3D_1$ entspricht. Hier wäre eine Rechnung für die im optischen Spektrum zu erwartenden Intensitäten und ein entsprechender Vergleich sehr interessant für die Termreihenfolge.

Rechnungen für Linienintensitäten wären auch wünschenswert im Falle der hier entdeckten $L_{23}M_{23}^2$-$M_1^2M_{23}^2$-Übergänge. Theoretische Daten könnten die hier nach der Energie vorgenommene Klassifizierung wesentlich ergänzen.

Im Falle der Linien, die zum Typ III gehören, ist eine weitergehende Untersuchung nötig. Es sollte versucht werden, diese Linien nach Anregung durch schwerere und langsamere Projektile zu untersuchen. Dabei wäre auch eine Untersuchung auf eine Abhängigkeit von der Möglichkeit des Elektronenaustausches denkbar, etwa durch Anregung mit $He^+$ und $He^{++}$.

Zusammenfassend kann man sagen, daß eine Vielzahl von Linien in dem komplexen Argon-$L_{2,3}$-Augerspektrum identifiziert wurde. Der experimentellen Auflösung sind durch die Überlappung vieler Linien Grenzen gesetzt. Eine höhere Auflösung als in dieser Arbeit erreicht wurde, bringt deshalb nicht mehr viel neue Informationen.

Für experimentelle Arbeiten und theoretische Untersuchungen dürfte vor allem der niederenergetische Teil des $L_{2,3}$-Augerspektrums noch von Interesse sein, da dort die Satellitenstrukturen offenbar nicht mehr so stark überlappen. Allerdings ist die Intensität dieser Satelliten sehr gering. Frühere Messungen (RDR75) haben gezeigt, daß bei Verwendung schwererer Projektile wie $Cl^{n+}$ und höherer Energien wie 30 MeV auch Satelliten ab 100 eV beobachtbar sind. Dieser Bereich des Spektrums von 100 eV an wäre interessant, um neue Erkenntnisse über die höheren Ionisationszustände zu gewinnen

Literaturhinweise


ACM56 S.K.Allison, J.Cuevas, P.G.Murphy; Phys.Rev. 102(1956)1041

BS58 C.F.Barnett, P.M.Stier; Phys.Rev. 109(1958)385

CC74 M.H.Chen, B.Crasemann; Phys.Rev.A 10(1974)2232

Ch72 Childs; Case Studies in Atomic Physics 3(1972)256

CM74a B.Cleff, W.Mehlhorn; J.Phys.B: Atom.Molec.Phys. 7 (1974)593,605

CM74b B.Cleff, W.Mehlhorn; J.Phys.B:Atom.Molec.Phys. 7 (1974)605

CPC C.P.C.Program Library, The Queen's University of Belfast, Belfast BT7 1NN Northern Ireland

CS70 E.U.Condon, G.H.Shortley:"The Theory of Atomic Spectra" (Cambridge University Press, Cambridge, 1970)

De64 R.D.Deslattes; Phys.Rev. 133(1964)A390

De69 R.D.Deslattes; Phys.Rev.186(1969)1

Di76 J.Dieringer; Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, (1976),unveröffentlicht

FF72 C.Froese-Fischer; Comp.Phys.Comm.4(1972)107

FF77 C.Froese-Fischer; private Mitteilung

FJMS66 R.W.Fink, R.C.Jopson, H.Mark, and C.D.Swift; Rev.Mod.Phys.38(1966)513

Ga74 H.J.Gabler; Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, (1974),unveröffentlicht

HD069 F.Herman, J.P.VanDyke and I.B.Ortenburger; Phys.Rev.Lett.22(1969)807

HS63 F.Herman and S.Skillman;"Atomic Structure Calculations" (Prentice-Hall, Englewood-Cliffs,N.J.,1963)

HSM66 F.J. de Heer, J:Schutten, H.Moustafa; Physica 32(1966)1766

KCM71 M.O.Krause, T.A.Carlson, W.E.Moddeman; J.Phys.(Paris) 32(1971)C4-139

KHWR73 R.L.Kauffmann, F.Hopkins, C.W.Woods, P.Richard; Phys.Rev.Lett. 31(1973)621

KM66 H.Körber and W.Mehlhorn; Z.Phys.191(1966)217

Ko33 T.Koopmanns; Physica1(1933)104

Ko73 T.Kondow, T.Kawai, K.Kunimori, T.Onishi, K.Tamaru; J.Phys.B:Atom.Molec.Phys.6(1973)L156

Kr74 M.O.Krause; in "Atomic Inner-Shell Processes II", ed. B.Crasemann(Academic Press, New York, 1975)

La71a F.P.Larkins; J.Phys.B:Atom.Molec.Phys.4(1971)1

La71b F.P.Larkins; J.Phys.B:Atom.Molec.Phys.4(1971)14

LN45 A.E.Lindh, A.Nilsson, Arkiv Mat.Astron.Fys.31A,No7 (1945);31B,No11(1945)

Lu69 R.Ludwig:"Methoden der Fehler- und Ausgleichsrechnung" (Vieweg, Braunschweig, 1969)

Lu77 W.L.Luken; private Mitteilung

Ma47 H.H.Marvin; Phys.Rev. 71(1947)102

Ma67 J.B.Mann:"Atomic Structure Calculations. I. Hartree-Fock Energy Results for the Elements Hydrogen to Lawrencium"(Los Alamos Scientific Labory Report No. LASL-3690, 1967, unveröffentlicht)

McG71 E.J.McGuire; Phys.Rev.A3(1971)1801

McG75a E,J.McGuire; Phys.Rev.A11(1975)17

McG75b E.J.McGuire; Phys.Rev.A11(1975)1880

McG75c E.J.McGuire; in "Atomic Inner-Shell Processes", ed. B.Crasemann (Academic Press, New York, 1975)326

McG77 E.J.McGuire: private Mitteilung

Me68 W.Mehlhorn; Z.Phys.208(1968)1

Me70 W.Mehlhorn:"The Auger Effect", Vorlesun sskripte (University of Nebraska, 1970) unveröffentlicht

MFSM76 D.L.Matthews, R.J.Fortner, D.Scnneider, C.F.Moore; Phys.Rev.A 14(1976)1561

Mo49 C.E.Moore:"Atomic Energy Levels",vol.I,Circular 467, (Washington:Nat. Bureau of Standards. 1949)

MOB68 D.F.Mayers and F.O'Brien; J.Phys.B(Proc.Phys.Soc.) 1(1968)145

MS68 W.Mehlhorn, D.Stahlherm; Z.Phys.217(1968)294

MSV68 W.Mehlhorn, D.Stahlherm und H.Verbeek; Z.Naturforsch.23a(1968)287

Na68 M.Nakamura, M.Sasanuma, S.Sato, M.Watanabe, H.Yamashita, Y.Iguchi,A.Ejiri, S.Nakai, S.Jamaguchi, T.Sagawa, Y.Nakai, and T.Oshio; Phys.Rev.Lett.21(1968)1303

NANS76 J.Nordgren, H.Ågren, C.Nordling, K.Siegbahn; Int. Conf. on the Phys. of X-ray Spectra, ed. R.D.Deslattes (Nat. Bur. of Standards, Gaithersburg/Md., 1976)

Oo74 H.Oona; Phys.Rev.Lett. 32(1974)571

RDR75 D.Ridder, P.Dahl, M.Rødbro: Wissenschaftlicher Ergebnisbericht, Bereich Kern- und Strahlenphysik (Hahn-Meitner-Institut, Berlin, 1975) unveröffentlicht

RDS75 D.Ridder, J.Dieringer and N.Stolterfoht; IX$^{th}$ ICPEAC, Abstr. of Papers, eds. J.S.Risley and R.Geballe (University of Washington, Seattle/Wash., 1975) p 419

RDS76 D.Ridder, J.Dieringer and N.Stolterfoht; J.Phys.B: Atom.Molec.Phys.9(1976)L307

RM72 M.E.Rudd, J.H.Macek; Case Studies in Atomic Physics 3 (1976)47

Ru55 R.A.Rubenstein; Ph.D. Thesis, University of Illinois (1955) unveröffentlicht

SB56 P.M.Stier, C.F.Barnett; Phys.Rev. 103(1956)896

Sla60 J.C.Slater:"Quantum Theory of Atomic Structure" (McGraw-Hill, New York, 1960)

Sob72 I.I.Sobel'man:"Introduction to the Theory of Atomic Spectra"(Pergamon Press, Oxford, 1972)

SR75 N.Stolterfoht, D.Ridder; Programm RRISI(1975),unver= öffentlicht

SS16 M.Siegbahn and W.Stenström; Z.Phys.17(1916)48,318

SSZ74 N.Stolterfoht, D.Schneider and P.Ziem; Phys.Rev.A 10(1974)81

Sto71a N.Stolterfoht:"Energie- und Winkelverteilung der bei Ionisation von Gasmolekülen durch Protonen ausgelösten Elektronen", HMI-Bericht 104 (Hahn-Meitner-Institut, Berlin, 1971)

Sto71b N.Stolterfoht; Z.Phys.248(1971)81

Sto76 N.Stolterfoht;"Excitation in Energetic Ion Atom Collisions Accompanied by Electron Emission", erscheint in Modern Physics, herausgeg. von I.A.Sellin (Springer-Verlag, Berlin)

VR70 D.J.Volz and M.E.Rudd; Phys.Rev.A2(1970)1395

WB71 D.L.Walters and C.P.Bhalla; Phys.Rev. A4(1971)2164

WBS73 L.O.Werme, T.Bergmark and K.Siegbahn; Physica Scripta8 (1973)149

Wy65 B.G.Wybourne:"Spectroscopic Properties of Rare Earths" (Interscience Publ., New York, 1965)

Anhang

Tab. A.1

Energien und Intensitäten der untersuchten Linien

Die Intensitäten wurden auf die Intensität der $L_{23}M_{23}^2(^3D_3)$-$M_1^2M_{23}(^2P)$-Satellitenlinie bei 160,64 eV normiert. Die Energien sind für dieselbe Linie an die Energien von Werme et.al. /WBS73/ angepaßt. Der Fehler der absoluten Energien beträgt ± 20 meV. $\Gamma$ ist die natürliche Linienbreite.

Tab. A.2

Übersicht über die beobachteten Linien mit Klassifikationen und Angabe des Typs

Die angegeben relativen Intensitäten wurden bei Anregung durch 200-keV-$H^+$ gemessen. Die angegebene Linienbreite ist die natürliche Breite.

Tab. A.1 Energien und Intensitäten der untersuchten Linien. Die Intensitäten wurden auf die Intensität der $L_{23}M_{23}^2(^3D_3)$-$M_1^2M_{23}(^2P)$-Satellitenlinie bei 160,64 eV normiert. Die Energien sind für dieselbe Linie an die Energien von Werme et.al. /WBS73/ angepaßt. Der Fehler der absoluten Energien beträgt ±20 meV. $\Gamma$ ist die natürliche Linienbreite.

| Nr. | E [eV] | $\Gamma$ [meV] | 500keV $H^+$ | 400keV $H^+$ | 300keV $H^+$ | 200keV $H^+$ | 100keV $H^+$ | 500keV $He^+$ | 400keV $He^+$ | 300keV $He^+$ | 2.5keV $e^-$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 146.36 | ≤20 | 6 | 8 | | 9 | | | | | |
| 2 | 146.61 | ≤20 | 35 | 35 | | 34 | | | | | |
| 3 | 147.26 | ≤20 | 3 | 1 | | 3 | | | | | |
| 4 | 147.52 | ≤20 | 10 | 8 | | 9 | | | | | |
| 5 | 147.77 | ≤20 | 5 | 5 | | 6 | | | | | |
| 6 | 148.08 | 60 | 14 | 14 | | 18 | | | | | |
| 7 | 148.54 | ≤20 | 1 | 4 | | 3 | | | | | |
| 8 | 148.80 | 50 | 20 | 19 | | 21 | | | | | |
| 9 | 149.26 | 100 | 16 | 15 | | 25 | | | | | |
| 10 | 149.75 | 200 | 4 | 4 | | 4 | | | | | |
| 11 | 150.20 | 300 | 8 | 8 | | 11 | | | | | |
| 12 | 150.86 | ≤20 | 26 | 26 | | 30 | | | | | |
| 13 | 151.71 | 70 | 21 | 22 | | 7 | | | | | |
| 14 | 152.12 | 50 | 24 | 21 | | 24 | | | | | |
| 15 | 152.39 | ≤20 | 6 | 3 | | 3 | | | | | |
| 16 | 152.81 | 30 | 10 | 6 | | 6 | | | | | |
| 17 | 153.25 | 100 | 30 | 20 | | 24 | | | | | |
| 18 | 153.67 | 200 | 14 | 7 | | 9 | | | | | |
| 19 | 153.95 | ≤20 | 2 | 4 | | 4 | | | | | |
| 20 | 154.26 | 300 | 18 | 14 | | 13 | | | | | |

| Nr. | E [eV] | Γ [meV] | 500keV $H^+$ | 400keV $H^+$ | 300keV $H^+$ | 200keV $H^+$ | 100keV $H^+$ | 500keV $He^+$ | 400keV $He^+$ | 300keV $He^+$ | 2.5keV $e^-$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 21 | 154.94 | 300 | 15 | 8 | | 4 | | | | | |
| 22 | 155.27 | 300 | 5 | 7 | | 3 | | | | | |
| 23 | 159.60 | 200 | 26 | 19 | 14 | 14 | | 47 | 76 | 68 | 22 |
| 24 | 160.34 | ≤20 | 31 | 25 | 28 | 32 | 42 | 48 | 71 | 56 | 26 |
| 25 | 160.64 | ≤20 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 |
| 26 | 161.28 | 120 | 26 | 21 | 23 | 16 | 26 | 29 | 41 | 27 | 22 |
| 27 | 161.65 | 120 | 20 | 17 | 20 | 15 | 26 | 35 | 21 | 17 | 17 |
| 28 | 162.25 | 80 | 41 | 36 | 35 | 27 | 24 | 23 | 24 | 16 | 69 |
| 29 | 162.53 | 70 | 19 | 12 | 10 | 12 | 31 | 22 | 28 | 16 | 12 |
| 30 | 162.80 | 50 | 57 | 49 | 52 | 51 | 45 | 53 | 58 | 48 | 59 |
| 31 | 163.29 | 100 | 17 | 13 | 15 | 18 | 37 | 81 | 92 | 91 | 16 |
| 32 | 163.65 | 100 | 5 | 8 | 9 | 15 | 18 | 25 | 31 | 27 | 13 |
| 33 | 163.92 | 100 | 32 | 30 | 30 | 42 | 61 | 55 | 67 | 57 | 30 |
| 34 | 164.14 | 120 | 12 | 9 | 14 | 10 | | 33 | 38 | 50 | 18 |
| 35 | 164.32 | 120 | 20 | 26 | 17 | 21 | | 26 | 24 | 30 | 27 |
| 36 | 164.42 | 150 | 33 | 24 | 17 | 21 | | | 13 | 30 | 47 |
| 37 | 164.83 | 170 | 49 | 28 | 28 | 40 | 49 | 23 | 38 | 37 | 43 |
| 38 | 165.17 | 100 | 80 | 60 | 77 | 74 | 61 | 73 | 81 | 97 | 71 |
| 39 | 165.42 | 150 | 1 | 19 | 4 | 14 | 29 | 23 | 37 | 42 | 19 |
| 40 | 165.90 | 200 | 27 | 28 | 30 | 38 | 49 | 71 | 95 | 120 | 22 |

| Nr. | E [eV] | Γ [meV] | 500keV $H^+$ | 400keV $H^+$ | 300keV $H^+$ | 200keV $H^+$ | 100keV $H^+$ | 500keV $He^+$ | 400keV $He^+$ | 300keV $He^+$ | 2.5keV $e^-$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 41 | 166.16 | 200 | 14 | 22 | 25 | 29 | 12 | 11 | 28 | 37 | 26 |
| 42 | 166.42 | 150 | | 13 | 7 | 11 | 20 | 27 | 32 | 31 | 3 |
| 43 | 166.66 | 100 | 40 | 14 | 23 | 41 | 33 | 33 | 58 | 52 | 20 |
| 44 | 166.78 | 100 | 35 | 51 | 52 | 46 | 51 | 44 | 41 | 71 | 54 |
| 45 | 167.03 | 130 | 41 | 48 | 44 | 45 | 52 | 21 | 44 | 33 | 47 |
| 46 | 167.41 | 80 | 27 | 31 | 33 | 37 | 24 | 34 | 52 | 43 | 33 |
| 47 | 167.69 | 120 | 8 | 10 | 1 | 10 | 32 | | 18 | 9 | 13 |
| 48 | 167.86 | 150 | 36 | 36 | 48 | 48 | 21 | 45 | 69 | 63 | 53 |
| 49 | 168.13 | 150 | 39 | 41 | 39 | 37 | 42 | 29 | 34 | 35 | 31 |
| 50 | 168.38 | 200 | 8 | 28 | 26 | 31 | 26 | 43 | 80 | 51 | 25 |
| 51 | 168.92 | 100 | 38 | 39 | 42 | 48 | 27 | 56 | 75 | 80 | 36 |
| 52 | 169.30 | 150 | 59 | 65 | 69 | 76 | 70 | 78 | 96 | 97 | 62 |
| 53 | 169.69 | 200 | 38 | 43 | 41 | 38 | 48 | 57 | 91 | 88 | 45 |
| 54 | 170.06 | 200 | 42 | 46 | 38 | 41 | 25 | | 15 | 5 | 70 |
| 55 | 170.50 | 400 | 13 | 36 | 25 | 39 | 44 | 73 | 97 | 105 | 30 |
| 56 | 170.90 | 400 | 8 | 16 | 19 | 18 | 21 | 16 | 35 | 37 | 17 |
| 57 | 171.26 | 250 | 34 | 29 | 21 | 36 | 27 | 58 | 79 | 82 | 34 |
| 58 | 171.60 | 100 | 55 | 47 | 49 | 39 | 32 | 25 | 37 | 37 | 110 |
| 59 | 172.00 | 300 | 25 | 33 | 21 | 25 | 36 | 61 | 73 | 111 | 21 |
| 60 | 173.65 | 140 | 103 | 90 | 96 | 95 | 88 | 76 | 34 | 55 | 160 |

| Nr. | E [eV] | Γ [meV] | 500keV $H^+$ | 400keV $H^+$ | 300keV $H^+$ | 200keV $H^+$ | 100keV $H^+$ | 500keV $He^+$ | 400keV $He^+$ | 300keV $He^+$ | 2.5keV $e^-$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 61 | 173.83 | 80 | 22 | 31 | 36 | 40 | 39 | 50 | 68 | 70 | 56 |
| 62 | 174.22 | 80 | 88 | 75 | 82 | 74 | 97 | 48 | 37 | 55 | 154 |
| 63 | 174.56 | 150 | | | | | | 37 | 30 | 40 | |
| 64 | 174.96 | 80 | 37 | 35 | 48 | 50 | 88 | 50 | 33 | 32 | 53 |
| 65 | 175.29 | 200 | 34 | 33 | 44 | 51 | 111 | 69 | 62 | 66 | 46 |
| 66 | 175.76 | 100 | 90 | 89 | 88 | 82 | 80 | 39 | 25 | 20 | 187 |
| 67 | 175.93 | 100 | 32 | 39 | 48 | 57 | 103 | 63 | 49 | 34 | 49 |
| 68 | 176.37 | ≤20 | 49 | 61 | 63 | 66 | 80 | 52 | 40 | 42 | 102 |
| 69 | 176.66 | ≤20 | 85 | 137 | 149 | 148 | 136 | 126 | 107 | 135 | 156 |
| 70 | 176.98 | 200 | 107 | 31 | 37 | 46 | 124 | 80 | 59 | 43 | 41 |
| 71 | 177.40 | 70 | 72 | 54 | 53 | 58 | 64 | 46 | 33 | 28 | 96 |
| 72 | 177.56 | 150 | | 27 | 48 | 42 | 96 | 56 | 40 | 38 | 19 |
| 73 | 177.94 | 90 | 314 | 352 | 331 | 297 | 216 | 144 | 114 | 137 | 718 |
| 74 | 178.46 | 100 | 82 | 82 | 84 | 100 | 146 | 172 | 147 | 121 | 96 |
| 75 | 178.68 | 60 | 50 | 85 | 82 | 71 | 66 | 33 | 24 | 27 | 153 |
| 76 | 179.01 | 140 | 258 | 259 | 259 | 243 | 217 | 179 | 162 | 158 | 426 |
| 77 | 179.53 | 140 | 112 | 99 | 112 | 109 | 134 | 75 | 62 | 68 | 200 |
| 78 | 179.73 | 150 | | | | | | 61 | 56 | 49 | |
| 79 | 180.08 | 50 | 144 | 140 | 136 | 125 | 83 | 55 | 30 | 23 | 302 |
| 80 | 180.37 | 300 | 100 | 94 | 121 | 145 | 243 | 338 | 344 | 322 | 117 |

| Nr. | E [eV] | Γ [meV] | 500keV $H^+$ | 400keV $H^+$ | 300keV $H^+$ | 200keV $H^+$ | 100keV $H^+$ | 500keV $He^+$ | 400keV $He^+$ | 300keV $He^+$ | 2.5keV $e^-$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 81 | 180.80 | 110 | 73 | 99 | 94 | 99 | 111 | 76 | 70 | 68 | 151 |
| 82 | 180.98 | 60 | 64 | 74 | 86 | 106 | 93 | 200 | 136 | 151 | 74 |
| 83 | 181.18 | 170 | 172 | 167 | 177 | 183 | 226 | 178 | 253 | 260 | 245 |
| 84 | 181.47 | 100 | | | | | | 85 | 92 | 77 | |
| 85 | 181.60 | 200 | 52 | 39 | 54 | 61 | 118 | | | | 75 |
| 86 | 182.00 | 200 | 60 | 78 | 110 | 130 | 129 | 71 | 157 | 189 | 88 |
| 87 | 182.10 | 400 | 153 | 178 | 214 | 242 | 324 | 511 | 210 | 430 | 176 |
| 88 | 182.84 | 250 | 19 | 33 | 46 | 50 | 115 | 138 | 111 | 87 | 25 |
| 89 | 183.03 | 500 | 72 | 76 | 95 | 103 | 29 | 127 | 105 | 177 | 127 |
| 90 | 183.33 | 500 | 84 | 97 | 118 | 135 | 247 | 309 | 256 | 224 | 71 |
| 91 | 183.93 | 400 | 49 | 61 | 87 | 93 | 163 | 263 | 218 | 229 | 63 |
| 92 | 184.53 | 250 | 49 | 78 | 133 | 145 | 178 | 323 | 297 | 349 | 87 |
| 93 | 185.04 | 300 | 84 | 79 | 103 | 118 | 131 | 161 | 133 | 137 | 97 |
| 94 | 185.43 | 300 | 26 | 31 | 34 | 26 | 98 | 83 | 56 | 37 | 26 |
| 95 | 185.77 | 150 | 7 | 16 | 21 | 33 | 41 | 63 | 41 | 43 | 28 |
| 96 | 186.08 | 100 | 15 | 18 | 28 | 24 | 41 | 59 | 48 | 59 | 19 |
| 97 | 186.66 | 1000 | 135 | 184 | 226 | 295 | 456 | 689 | 598 | 717 | 135 |
| 98 | 187.37 | 100 | 329 | 353 | 391 | 302 | 192 | 98 | 76 | 66 | 817 |
| 99 | 187.62 | 100 | 97 | 84 | 10 | 20 | 47 | 35 | 17 | 23 | 42 |
| 100 | 187.90 | 300 | 26 | 31 | 54 | 60 | 86 | 86 | 79 | 89 | 80 |

| Nr. | E [eV] | Γ [meV] | 500keV $H^+$ | 400keV $H^+$ | 300keV $H^+$ | 200keV $H^+$ | 100keV $H^+$ | 500keV $He^+$ | 400keV $He^+$ | 300keV $He^+$ | 2.5keV $e^-$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 101 | 188.14 | 300 | 49 | 48 | 63 | 76 | 132 | 158 | 133 | 160 | 42 |
| 102 | 188.65 | 250 | 18 | 37 | 72 | 68 | 101 | 110 | 106 | 99 | 80 |
| 103 | 188.73 | 250 | 57 | 59 | 39 | 47 | 59 | 66 | 48 | 87 | 36 |
| 104 | 189.10 | 150 | 12 | 15 | 30 | 43 | 81 | 95 | 73 | 79 | 20 |
| 105 | 189.51 | 100 | 189 | 191 | 224 | 198 | 154 | 125 | 94 | 117 | 454 |
| 106 | 189.85 | 200 | 91 | 62 | 47 | 65 | 125 | 112 | 90 | 100 | 59 |
| 107 | 190.15 | 50 | 46 | 67 | 95 | 100 | 109 | 132 | 119 | 151 | 74 |
| 108 | 190.44 | ≤20 | 98 | 110 | 144 | 144 | 150 | 149 | 128 | 146 | 131 |
| 109 | 190.75 | 250 | 153 | 133 | 156 | 218 | 191 | 163 | 177 | 178 | 179 |
| 110 | 191.11 | 110 | 351 | 403 | 409 | 351 | 169 | 91 | 55 | 43 | 944 |
| 111 | 191.25 | 100 | 243 | 245 | 197 | 172 | 229 | 186 | 184 | 138 | 251 |
| 112 | 191.63 | 150 | 140 | 46 | 78 | 69 | 218 | 215 | 83 | 183 | 65 |
| 113 | 191.91 | 100 | 184 | 162 | 177 | 223 | 302 | 196 | 168 | 216 | 174 |
| 114 | 192.16 | ≤20 | 183 | 222 | 240 | 264 | 231 | 196 | 170 | 174 | 278 |
| 115 | 192.36 | 200 | 151 | 122 | 89 | 126 | 305 | 121 | 121 | 100 | 122 |
| 116 | 192.61 | 50 | 76 | 78 | 81 | 94 | 66 | 37 | 24 | 20 | 128 |
| 117 | 192.76 | 50 | 151 | 101 | 105 | 108 | 140 | 81 | 64 | 72 | 116 |
| 118 | 192.98 | 50 | 162 | 154 | 171 | 181 | 193 | 132 | 111 | 103 | 156 |
| 119 | 193.13 | 100 | 226 | 234 | 216 | 208 | 179 | 69 | 66 | 72 | 531 |
| 120 | 193.33 | 50 | 82 | 105 | 98 | 99 | 134 | 86 | 76 | 81 | 125 |

| Nr. | E [eV] | Γ [meV] | 500keV $H^+$ | 400keV $H^+$ | 300keV $H^+$ | 200keV $H^+$ | 100keV $H^+$ | 500keV $He^+$ | 400keV $He^+$ | 300keV $He^+$ | 2.5keV $e^-$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 121 | 193.70 | 500 | 137 | 117 | 126 | 184 | 372 | 97 | 63 | 33 | 163 |
| 122 | 194.09 | 350 | 180 | 201 | 256 | 272 | 384 | 244 | 206 | 218 | 229 |
| 123 | 194.49 | 50 | 114 | 60 | 83 | 92 | 111 | 66 | 46 | 54 | 114 |
| 124 | 194.67 | 100 | 201 | 262 | 207 | 238 | 196 | 153 | 148 | 178 | 318 |
| 125 | 194.94 | 200 | 97 | 90 | 89 | 107 | 206 | 69 | 60 | 57 | 100 |
| 126 | 195.40 | 100 | 71 | 69 | 83 | 94 | 124 | 72 | 53 | 48 | 80 |
| 127 | 195.59 | 100 | 96 | 115 | 127 | 145 | 184 | 124 | 105 | 112 | 127 |
| 128 | 195.99 | 150 | 128 | 122 | 125 | 133 | 179 | 97 | 75 | 74 | 139 |
| 129 | 196.40 | 200 | 206 | 228 | 235 | 247 | 284 | 147 | 113 | 131 | 237 |
| 130 | 196.46 | 50 | 5 | 1 |  | 11 |  | 20 | 32 | 30 | 35 |
| 131 | 196.64 | 100 | 181 | 212 | 223 | 185 | 164 | 133 | 118 | 162 | 288 |
| 132 | 196.84 | 150 | 132 | 70 | 95 | 82 | 132 | 59 | 63 | 60 | 131 |
| 133 | 197.14 | 200 | 44 | 54 | 49 | 52 | 78 | 33 | 19 | 18 | 61 |
| 134 | 197.49 | 300 | 58 | 56 | 64 | 85 | 150 | 63 | 54 | 66 | 78 |
| 135 | 198.07 | 300 | 81 | 99 | 97 | 107 | 142 | 61 | 44 | 53 | 104 |
| 136 | 198.31 | 300 | 51 | 27 | 31 | 29 | 47 | 12 | 1 | 8 | 47 |
| 137 | 201.12 | 100 | 444 | 495 | 452 | 371 | 198 | 101 | 88 | 94 | 1096 |
| 138 | 203.26 | 100 | 436 | 372 | 230 | 217 | 167 | 17 | 37 | 59 | 490 |
| 139 | 203.51 | 100 | 1683 | 1871 | 1796 | 1514 | 817 | 365 | 302 | 283 | 4304 |
| 140 | 205.21 | 100 | 1835 | 1955 | 1778 | 1531 | 798 | 319 | 242 | 222 | 3969 |
| 141 | 205.62 | 100 | 1177 | 967 | 923 | 789 | 437 | 178 | 134 | 136 | 2304 |
| 142 | 205.23 | 100 | 832 | 740 | 726 | 604 | 328 | 136 | 112 | 109 | 1476 |

Tab. A.2 Übersicht über die beobachteten Linien mit Klassifikationen und Angabe des Typs. Die angegebenen relativen Intensitäten I wurden bei Anregung durch 200 keV $H^+$ gemessen. Die angegebene Linienbreite ist die natürliche Breite.

| Nr. | Energy [eV] | I [Rel. Units] | Line-width [meV] | Type | This Work | Cfd. | Other Authors | Remarks |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 146.36 | 9 | ≤20 | II | $L_{23}M_{23}^2(1/2f) - M_1^2M_{23}^2(^1S)$ | b | | see p. 91 ff |
| 2 | 146.61 | 34 | ≤20 | II | " $(7/2b) -$ " $(^1S)$ | b | | " |
| 3 | 147.26 | 3 | ≤20 | II | " $(5/2e) -$ " $(^1S)$ | b | | " |
| | | | | or | " $(5/2d) -$ " $(^1S)$ | b | | " |
| 4 | 147.52 | 9 | ≤20 | II | " $(3/2h) -$ " $(^1S)$ | b | | " |
| 5 | 147.77 | 6 | ≤20 | II | " $(3/2g) -$ " $(^1S)$ | b | | " |
| 6 | 148.08 | 18 | 60 | II | " $(1/2e) -$ " $(^1S)$ | b | | " |
| 7 | 148.54 | 3 | ≤20 | II | " $(5/2c) -$ " $(^1S)$ | b | | " |
| | | | | or | " $(3/2c) -$ " $(^1S)$ | b | | " |
| 8 | 148.80 | 21 | 50 | II | " $(5/2c) -$ " $(^1S)$ | b | | " |
| | | | | or | " $(3/2c) -$ " $(^1S)$ | b | | " |
| 9 | 149.26 | 25 | 100 | II | " $(1/2d) -$ " $(^1S)$ | b | | " |
| 10 | 149.75 | 4 | 200 | II | " $(1/2c) -$ " $(^1S)$ | b | | " |

| Nr. | Energy [eV] | I [Rel. Units] | Line-width [meV] | Type | This Work | Cfd. | Other Authors | Remarks |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 11 | 150.20 | 11 | 300 | II | $L_{23}M_{23}^2(3/2e)$ - $M_1M_{23}(^1S)$ | b | | see p. 91 ff |
| 12 | 150.86 | 30 | ≤20 | II | " $(7/2b)$ - " $(^1D)$ | b | | " |
| 13 | 151.71 | 7 | 70 | II | " $(3/2h)$ - " $(^1D)$ | b | | " |
| 14 | 152.12 | 24 | 50 | II | " $(3/2g)$ - " $(^1D)$ | b | | " |
| 15 | 152.39 | 3 | ≤20 | II | " $(1/2e)$ - " $(^1D)$ | b | | " |
| 16 | 152.81 | 6 | 30 | II | " $(5/2c)$ - " $(^1D)$ | b | | " |
| | | | | or | " $(3/2f)$ - " $(^1D)$ | b | | " |
| 17 | 153.25 | 24 | 100 | II | ? | | | |
| 18 | 153.67 | 9 | 200 | II | " $(7/2b)$ - " $(^3P)$ | b | | " |
| 19 | 153.95 | 4 | ≤20 | II | " $(1/2c)$ - " $(^1D)$ | b | | " |
| 20 | 154.26 | 13 | 300 | II | ? | | | |
| 21 | 154.94 | 4 | 300 | II | " $(3/2g)$ - " $(^3P)$ | b | | " |
| 22 | 155.27 | 3 | 300 | II | " $(1/2e)$ - " $(^3P)$ | b | | " |
| 23 | 159.60 | 14 | 200 | III | ? | | | |
| 24 | 160.34 | 32 | ≤20 | II | $L_{23}M_{23}(^1P_1)$ - $M_1^2M_{23}(^2P)$ | a | | see p. 66 ff |

| Nr. | Energy [eV] | I [Rel. Units] | Line-width [meV] | Type | This Work | Cfd. | Other Authors | Remarks |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 25 | 160.64 | 100 | ≤20 | II | $L_{23}M_{23}(^3D_3)$ - $M_1^2M_{23}(^2P)$ | a | | see p. 66 ff |
| 26 | 161.28 | 16 | 120 | II | ? | | | |
| 27 | 161.65 | 15 | 120 | II | " $(^3D_2)$ - " $(^2P)$ | a | | " |
| 28 | 162.29 | 27 | 80 | I | $L_3$ $-(3p^3)^2D(5d)^1P^o$ | b | same[a] | see p. 56 ff |
| | | | | or | $L_3$ - " $^3P^o$ | b | - | " |
| 29 | 162.53 | 12 | 70 | II/III | $L_{23}M_{23}(^3S_1)$ - $M_1^2M_{23}(^2P)$ | b | | see p. 66 ff |
| 30 | 162.86 | 51 | 50 | II | " $(^3D_1)$ - " $(^2P)$ | a | | " |
| 31 | 163.29 | 18 | 100 | III | ? | | | |
| 32 | 163.65 | 15 | 100 | III | ? | | | |
| 33 | 163.92 | 42 | 100 | II | ? | | | |
| 34 | 164.14 | 10 | 120 | III | ? | | | |
| 35 | 164.32 | 21 | 120 | II | ? | | | |
| 36 | 164.42 | 21 | 150 | I | $L_2$ $-(3p^3)^2D(5d)^1P^o$ | b | same[a] | see p. 56 ff |
| | | | | or | $L_3$ - " $^3P^o$ | b | - | " |
| 37 | 164.83 | 40 | 170 | II | | | | |
| 38 | 165.17 | 74 | 100 | II | | | | |
| 39 | 165.42 | 14 | 150 | III | | | | |

| Nr. | Energy [eV] | I [Rel. Units] | Line-width [meV] | Type | This Work | Cfd. | Other Authors | Remarks |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 40 | 165.90 | 38 | 200 | III | | | | |
| 41 | 166.16 | 29 | 200 | II | | | | |
| 42 | 166.42 | 11 | 150 | III | | | | |
| 43 | 166.66 | 41 | 100 | II | | | | |
| 44 | 166.78 | 46 | 100 | II | | | | |
| 45 | 167.03 | 45 | 130 | II | | | | |
| 46 | 167.41 | 37 | 80 | II | | | | |
| 47 | 167.69 | 10 | 120 | II | | | | |
| 48 | 167.86 | 48 | 150 | II | | | | |
| 49 | 168.13 | 37 | 150 | II | | | | |
| 50 | 168.38 | 31 | 200 | III | | | | |
| 51 | 168.92 | 48 | 100 | II | | | | |
| 52 | 169.30 | 76 | 150 | II | | | | |
| 53 | 169.69 | 38 | 200 | III | | | | |
| 54 | 170.06 | 41 | 200 | I | $L_3$ $-(3p^3)^2P(5s)^1P^o$ | a | | see p 56 ff |

| Nr. | Energy [eV] | I [Rel. Units] | Line-width [meV] | Type | This Work | | | Cfd. Other Authors | Remarks |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 55 | 170.50 | 39 | 400 | III | | | | | |
| 56 | 170.90 | 18 | 400 | II | | | | | |
| 57 | 171.26 | 36 | 250 | III | | | | | |
| 58 | 171.60 | 39 | 100 | I | $L_3$ | $-(3p^3)^2D(4d)^3P^o$ | a | $L_3-(3p^3)^2D(4d)^1P^o$ a) or $L_3-$ " $^3P^o$ a) | see p. 56 ff " |
| 59 | 172.00 | 25 | 300 | III | $L_2$ | $-(3p^3)^2P(5s)^1P^o$ | c | | "" |
| 60 | 173.65 | 95 | 140 | I | $L_3$ | $-M_1^2(^1S^e)$ | a | | " |
| | | | | or | $L_3$ | $-(3p^3)^2P(4p)^1S^e$ | c | | " |
| 61 | 173.85 | 40 | 80 | II/III | $L_{23}M_{23}(^1P_1)$ and $L_2$ | $-M_1M_{23}^2(^2P)$ | b | $L_2-(3p^3)^2D(4d)^3P^o$ a) | " |
| | | | | | | $-(3p^3)^2D(4d)^3P^o$ | c | or $L_3-(3p^3)^2D(4d)^1P^o$ a) | " |
| 62 | 174.22 | 74 | 80 | I | $L_3$ | $-(3p^3)^2P(3d)^1P^o$ | c | $L_3-M_1^2(^1S^e)$ a) | " |
| 63 | 174.56 | 37* | 150 | ? | | | | | |
| 64 | 174.96 | 50 | 80 | II | | | | | |
| 65 | 175.29 | 51 | 200 | II | $L_{23}M_{23}(^3D_2)$ | $-M_1M_{23}^2(^2P)$ | a | | see p. 79 ff |
| 66 | 175.76 | 82 | 100 | I | $L_2$ | $-M_1^2(^1S^e)$ | a | $L_3-(3p^3)^2P(4p)^1S^e$ a) | see p. 56 ff |
| | | | | or | $L_2$ | $-(3p^3)^2P(4p)^1S^e$ | b | | " |

| Nr. | Energy [eV] | I [Rel. Units] | Line-width [meV] | Type | This Work | | Cfd. Other Authors | | Remarks |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 67 | 175.93 | 57 | 100 | II | $L_{23}M_{23}(^3S_1)$ | - $M_1M_{23}^2(^2P)$ | b | | see p. 79 ff |
| 68 | 176.37 | 66 | ≤20 | I/II | $L_2$ | $-(3p^3)^2P(3d)^1P^o$ | c | $L_2$-$M_1^2(^1S^e)$ | see p. 56 ff |
| 69 | 176.66 | 148 | ≤20 | II | $L_{23}M_{23}(^3D_3)$ | - $M_1M_{23}^2(^2D)$ | a | | see p. 79 ff |
| 70 | 176.98 | 46 | 200 | II/III | | ? | | | |
| 71 | 177.40 | 58 | 70 | I | | ? | | | |
| 72 | 177.56 | 42 | 150 | II/I | | ? | | | |
| 73 | 177.94 | 297 | 90 | I | | ? | | $L_2$-$(3p^3)^2P(4p)^1S^e$ a) or $L_3$-$(3p^3)^2D(3d)^1P^o$ a) or $L_3$-$M_1^2(^1S^e)$ b) | see p. 56 ff " " |
| 74 | 178.46 | 100 | 100 | III/II | | ? | | | |
| 75 | 178.68 | 71 | 60 | I | $L_3$ | $-(3p^3)^2P(3d)^3P^o$ | a | same a),b) or $L_3$-$(3p^3)^2P(3d)^1P^o$ a) | " " |
| 76 | 179.01 | 243 | 140 | I | $L_3$ | $-(3p^3)^2P(4s)^1P^o$ | a | same a),b) | " |
| 77 | 179.53 | 109 | 140 | I/II | $L_3$ | $-(3p^3)^2P(4s)^3P^o$ | b | same a),b) | " |
| | | | | | and $L_{23}M_{23}(^1S_0)$ | - $M_1M_{23}^2(^2S)$ | c | | see p. 79 ff |
| 78 | 179.73 | 61* | 150 | ? | | ? | | | |

| Nr. | Energy [eV] | I [Rel. Units] | Line-width [meV] | Type | This Work | Cfd. | Other Authors | Remarks |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 79 | 180.08 | 125 | 50 | I | ? | | $L_2$-$(3p^3)^2D(3d)^1P^o$ a)<br>or<br>$L_2$-$M_1^2(^1S^e)$ b) | p. 56 ff<br>" |
| 80 | 180.37 | 145 | 300 | III | ? | | | |
| 81 | 180.80 | 99 | 110 | I/II | $L_2$ -$(3p^3)^2P(3d)^3P^o$ | a | same a)<br>or<br>$L_2$-$(3p^3)^2P(3d)^1P^o$ a) | "<br>" |
| 82 | 180.98 | 106 | 60 | II/III | ? | | $L_2$-$(3p^3)^2P(3d)^1P^o$? a) | " |
| 83 | 181.18 | 183 | 170 | II | $L_2$ -$(3p^3)^2P(4s)^1P^o$<br>and<br>$L_{23}M_{23}(^3D_2)$-$M_1M_{23}^2(^4P)$<br>and<br>$L_{23}M_{23}(^1D_2)$-$M_1M_{23}^2(^2D)$ | b<br>a<br>a | same a),b) | "<br>p. 79 ff<br>" |
| 84 | 181.41 | 85 | 100 | ? | ? | | | |
| 85 | 181.60 | 61 | 200 | II | $L_2$ -$(3p^3)^2P(4s)^3P^o$ | a | same a),b) | p. 56 ff |
| 86 | 182.00 | 130 | 200 | II | $L_{23}M_{23}(^3S_1)$-$M_1M_{23}^2(^4P)$ | a | | p. 79 ff |
| 87 | 182.10 | 242 | 400 | III | ? | | | |
| 88 | 182.84 | 50 | 250 | III | ? | | | |
| 89 | 183.03 | 105 | 500 | II | ? | | | |
| 90 | 183.33 | 135 | 500 | II/III | ? | | | |
| 91 | 183.93 | 93 | 400 | III | ? | | | |

| Nr. | Energy [eV] | I [Rel. Units] | Line-width [meV] | Type | This Work | | Cfd. | Other Authors | Remarks |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 92 | 184.53 | 145 | 250 | III | | ? | | | |
| 93 | 185.04 | 118 | 300 | II | | ? | | | |
| 94 | 185.43 | 26 | 300 | II(?) | | ? | | | |
| 95 | 185.77 | 33 | 150 | II(?) | | ? | | | |
| 96 | 186.08 | 24 | 100 | II | | ? | | | |
| 97 | 186.66 | 295 | 1000 | III | | ? | | | |
| 98 | 187.37 | 302 | 100 | I | $L_3$ | - $M_1M_{23}(^1P_1)$ | a | same [b] | see p. 45 ff |
| 99 | 187.62 | 20 | 100 | II | | ? | | | |
| 100 | 187.90 | 60 | 300 | II | | ? | | | |
| 101 | 188.14 | 76 | 300 | III | | ? | | | |
| 102 | 188.65 | 68 | 250 | II(?) | $L_{23}M_1(^3P_1)$ | - $M_1M_{23}^2(^2S)$ | b | | see p. 79 ff |
| 103 | 188.73 | 47 | 250 | II | | ? | | | |
| 104 | 189.10 | 43 | 150 | III | | ? | | | |
| 105 | 189.51 | 198 | 100 | I | $L_2$ | - $M_1M_{23}(^1P_1)$ | a | same [b),c] | see p. 45 ff |
| 106 | 189.85 | 65 | 200 | II | | ? | | | |

| Nr. | Energy [eV] | I [Rel. Units] | Line-width [meV] | Type | This Work | Cfd. | Other Authors | Remarks |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 107 | 190.15 | 100 | 50 | II | $L_{23}M_1(^3P_1)$ - $M_1M_{23}^2(^2P)$ and $L_{23}M_{23}(^1P_1)$ - $M_{23}^3(^2P)$ | a | | see p. 79 ff |
| | | | | | | | same [b),c)] | " |
| 108 | 190.44 | 144 | ≤20 | II | $L_{23}M_{23}(^3D_3)$ - $M_{23}^3(^2P)$ | a | same [b),c)] | " |
| 109 | 190.75 | 218 | 250 | II | $L_{23}M_1(^1P_1)$ - $M_1M_{23}^2(^2S)$ | a | same [c)] | " |
| 110 | 191.11 | 351 | 110 | I | $L_3$ - $M_1M_{23}(^3P_2)$ | a | same [b),c)] | see p. 45 ff |
| 111 | 191.25 | 172 | 100 | II | ? | | $L_{23}M_{23}(^3S_1)$-$M_{23}^3(^2P)$ [c)] | p. 79 ff |
| 112 | 191.63 | 69 | 150 | II | $L_{23}M_{23}(^3D_2)$ - $M_{23}^3(^2P)$ | c | same [b),c)] | " |
| 113 | 191.91 | 223 | 100 | II | ? | | $L_{23}M_{23}(^1P_1)$-$M_{23}^3(^2D)$ [b),c)] | " |
| 114 | 192.16 | 264 | 20 | II | $L_{23}M_{23}(^3D_3)$ - $M_{23}^3(^2D)$ and $L_{23}M_1(^1P_1)$ - $M_1M_{23}^2(^2P)$ | a | same [b),c)] | " |
| | | | | | | | same [c)] | " |
| 115 | 192.36 | 126 | 200 | II | ? | | | |
| 116 | 192.61 | 94 | 50 | II/I | $L_{23}M_1(^3P_1)$ - $M_1M_{23}^2(^2D)$ | b | | " |
| 117 | 192.76 | 108 | 50 | II | ? | | $L_{23}M_{23}(^3D_1)$-$M_{23}^3(^2P)$ [b),c)] | " |
| 118 | 192.98 | 181 | 50 | I/II | ? | | $L_{23}M_{23}(^3S_1)$-$M_{23}^3(^2D)$ | " |
| 119 | 193.13 | 208 | 100 | I | $L_2$ - $M_1M_{23}(^3P)$ | a | $L_2$-$M_1M_{23}(^3P)$ [b),c)] | see p. 45 ff |
| 120 | 193.33 | 99 | 50 | II | $L_{23}M_{23}(^3D_2)$ - $M_{23}^3(^2D)$ | c | same [b),c)] | see p. 79 ff |

| Nr. | Energy [eV] | I [Rel. Units] | Line-width [meV] | Type | This Work | Cfd. | Other Authors | Remarks |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 121 | 193.70 | 184 | 500 | II/I | ? | | | |
| 122 | 194.09 | 272 | 350 | II | $L_{23}M_{23}(^3S_1)$ - $M_{23}^3(^2D)$ | c | | see p. 79 ff |
| 123 | 194.49 | 92 | 50 | II | " $(^3D_1)$ - " $(^2D)$ | c | same[b),c)] | " |
| 124 | 194.67 | 238 | 100 | II | $L_{23}M_1(^1P_1)$ - $M_1M_{23}^2(^2D)$ | a | same[c)] | " |
| | | | | | | | or $L_{23}M_{23}(^1D_2)$-$M_{23}^3(^2P)$[b)] | " |
| 125 | 194.94 | 107 | 200 | II | ? | | $L_{23}M_{23}(^1D_2)$-$M_{23}^3(^2P)$[c)] | " |
| 126 | 195.40 | 94 | 100 | II | ? | | | |
| 127 | 195.59 | 145 | 100 | II | ? | | $L_{23}M_{23}(^3S_1)$-$M_{23}^3(^4S)$[c)] | " |
| 128 | 195.99 | 133 | 150 | II | $L_{23}M_1(^3P_1)$ - $M_1M_{23}^2(^4P)$ | b | $L_{23}M_{23}(^3D_2)$-$M_{23}^3(^4S)$[c)] | " |
| 129 | 196.40 | 247 | 200 | II | ? | | | |
| 130 | 196.46 | 11 | 50 | III? | ? | | $L_{23}M_{23}(^1D_2)$-$M_{23}^3(^2D)$[b)] | " |
| 131 | 196.64 | 185 | 100 | I/II | $L_{23}M_{23}(^3S_1)$ - $M_{23}^3(^4S)$ | a | $L_{23}M_{23}(^1D_2)$-$M_{23}^3(^2D)$[c)] | " |
| | | | | | or $L_{23}M_{23}(^1D_2)$ - $M_{23}^3(^2D)$ | b | or $L_{23}M_{23}(^1S_0)$-$M_{23}^3(^2P)$?[b)] | " |
| 132 | 196.84 | 82 | 150 | II | $L_{23}M_{23}(^1S_0)$ - $M_{23}^3(^2P)$ | c | same(?)[b)] | " |
| 133 | 197.14 | 52 | 200 | II | ? | | | |
| 134 | 197.49 | 85 | 300 | II | ? | | | |

| Nr. | Energy [eV] | I [Rel. Units] | Line-width [meV] | Type | This Work | Cfd. | Other Authors | Remarks |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 135 | 198.07 | 107 | 300 | II | $L_{23}M_1(^1P_1)$ - $M_1M_{23}^2(^4P)$ | a | | see p. 79 ff |
| 136 | 198.31 | 29 | 300 | II/I | $L_{23}M_{23}(^1S_0)$ - $M_{23}^3(^2D)$ | c | | " |
| 137 | 201.12 | 372 | 100 | I | $L_3$ - $M_{23}^2(^1S)$ | a | same b),c) | see p. 45 ff |
| 138 | 203.26 | 217 | 100 | I | $L_2$ - $M_{23}^2(^1S)$ | a | same b),c) | " |
| 139 | 203.51 | 1514 | 100 | I | $L_3$ - $M_{23}^2(^1D)$ | a | same b),c) | " |
| 140 | 205.21 | 1531 | 100 | I | $L_3$ - $M_{23}^2(^3P_{0,1,2})$ | a | same b),c) | " |
| 141 | 205.62 | 1177 | 100 | I | $L_2$ - $M_{23}^2(^1D)$ | a | same b),c) | " |
| 142 | 207.23 | 832 | 100 | I | $L_2$ - $M_{23}^2(^3P_{0,1,2})$ | a | same b),c) | |

a)/McG75b/, b)/WBS73/, c)/Di76/.

Cfd. : Confidence-level a = sure, b = probable , c = questionable.

* Only observed with $He^+$-impact, Intensity from normalized 500 keV $He^+$ data.

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen der Forschungstätigkeit der Arbeitsgruppe Atomphysik im Hahn-Meitner-Institut für Kernforschung, Berlin. Ich danke Herrn Dr. N. Stolterfoht für die Betreuung der Arbeit. Allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe danke ich für Unterstützung bei der Durchführung der Messungen. Zu besonderem Dank verpflichtet bin ich Frau Prof. Dr. C. Froese-Fischer , Pennsylvania State University (University Park), für eine ausführliche und anregende Korrespondenz über die Hartree-Fock-Rechnungen sowie für die Multi-Konfigurations-Rechnung. Auch Herrn Prof. Dr. E.J. McGuire, Sandia Laboratories (Albuquerque), möchte ich herzlich danken für sein Interesse und seine Unterstützung bei der theoretischen Behandlung der Linienintensitäten. Mein besonderer Dank für die Betreuung beim Abschluß der Arbeit sowie für anregende Diskussionen gilt Herrn Prof. Dr. K.H. Lindenberger.

Lebenslauf

Ich wurde am 22.7.1948 als Sohn des Versicherungsmathematikers Hanno Rìdder und seiner Ehefrau Elisabeth Ridder, geb. Adam, in Berlin geboren.

Von 1955 bis 1960 besuchte ich die 19. Grundschule in Berlin-Treptow und von 1960 bis 1961 die 5. Grundschule in Berlin-Kreuzberg. Anschließend war ich Schüler an der Leibniz-Oberschule in Berlin-Kreuzberg, einem neusprachlichen Gymnasium. Dort legte ich im Frühjahr 1968 die Reifeprüfung ab.

Seit April 1968 studiere ich an der Freien Universität Berlin Physik mit Nebenfach Mathematik. Mein Vordiplom absolvierte ich im Sommersemester 1970. Anfang 1971 begann ich mit der Diplomarbeit in der Abteilung Strahlenphysik des Hahn-Meitner-Instituts für Kernforschung, Berlin, unter Anleitung von Dr. N. Stolterfoht. Das Thema lautete: "Excitation of the $2s2p(^1P)$ Resonance of He by Fast Protons". Die Diplomprüfung legte ich im Sommersemester 1973 ab. Anschließend begann ich in der gleichen Arbeitsgruppe, die nunmehr zum Bereich Kern- und Strahlenphysik gehörte, die vorliegende Doktorarbeit. Von Dezember 1974 bis Februar 1975 war ich Gast der Atomphysikgruppe an der Universität Århus und führte Experimente am dortigen Tandem-Beschleuniger aus. Seit dem Sommersemester 1975 habe ich eine Anstellung als wissenschaftlicher Assistent an der Freien Universität Berlin und gehöre zum Institut für Kernphysik.

Druck: W. Hilke KG, Motzstraße 64, 1000 Berlin 30